

汎用量子化学計算パッケージ Gaussian 98 利用の手引き

Gaussian 98 は、様々な半経験的・非経験的手法に関する機能を持つ分子軌道計算プログラムです。気相中あるいは溶液中の分子に対する様々な物性・反応性などの計算を行うことができ、ハートリーフォック法とそれに電子相関を取り込んだ高精度な方法及び半経験的分子軌道と密度汎関数に基づいた量子化学計算を行うことができます。分子軌道計算を行うプログラムとしては最も著名なプログラムで、多くの国立大学・研究機関の計算機センターに導入されています。総合情報処理センターに導入されているのは Revision A.7 です。Gaussian 98 は研究利用サーバ ohara (HP9000V2500 PA-RISC 440MHz×8) で実行され、同時に実行されるジョブ数が 8 までは実行可能な最高速度 (1.76GFLOPS) で計算が行われます。

1 . Gaussian 98 の実行

kinkoh.cc.kagoshima-u.ac.jp (163.209.20.1) にログインします。

.cshrc に以下の行が無ければ追加し、「source .cshrc」として.cshrc をリロードします。追加した場合、次回のログインからは自動的にロードされます。

```
setenv GAUSS_EXEDIR "/opt/g98/bsd:/opt/g98/local:/opt/g98/extras:/opt/g98"
setenv GAUSS_ARCHDIR "/opt/g98/arch"
setenv PATH ${PATH}:$GAUSS_EXEDIR
setenv _RLD_ARGS "-log /dev/null"
setenv LD_LIBRARY_PATH ${GAUSS_EXEDIR}:${LD_LIBRARY_PATH}
setenv G98BASIS "/opt/g98/basis"
setenv MANPATH /opt/g98/bsd:$MANPATH
```

以下のコマンドで Gaussian 98 を実行します。

(1) インタラクティブジョブとして実行

コマンド	実行可能 CPU 時間	同時実行 ジョブ数
bsub -lp -m ohara g98 [入力ファイル]	60 分	4

インタラクティブジョブとして実行した場合は Ctrl-C で停止が可能です。インタラクティブジョブは数秒～数十秒で終了するようなテスト実行の場合に用いるのがよいでしょう。上記コマンドで実行した場合、

```
Job <34011> is submitted to default queue <l>.
```

```
<<Waiting for dispatch ...>>
```

のように、ジョブがキューに投入されたというメッセージと、ジョブ開始を待っていることを意味するメッセージが表示されます。しばらく待つと、

```
<<Starting on ohara>>
```

と表示され、ジョブが開始されます。ジョブが終了するとプロンプトが表示されますので、ビューア (more、less など) やエディタ (vi、emacs など) で出力ファイルを確認してください。出力ファイルを省略した場合は、標準出力に計算結果が出力されます。

(2) バッチジョブとして実行

コマンド	実行可能 CPU 時間	同時実行 ジョブ数
bsub -q A -m ohara g98 [入力ファイル]	60 分	4
bsub -q B -m ohara g98 [入力ファイル]	4 時間	2
bsub -q C -m ohara g98 [入力ファイル]	7 日間	1

通常はこの方法で Gaussian 98 を起動します。計算に必要とされる時間に応じてキューを分けてジョブを投入してください。短い計算を繰り返し行う必要がある場合などには、すべてのキューを使うことで 1 ユーザーあたり最大 7 ジョブまでの同時実行が可能です。インタラクティブジョブも加えるとさらに多くのジョブの同時実行が可能です。CPU 数の 8 を超えるジョブを同時に実行しても計算時間は短くなりません。他のユーザーのジョブ数と合わせて最大でもジョブ数が 8 以下になると効率よく計算できます。

実行中のジョブ数を確認するには、bhosts コマンドを使用します。例えば、実行中のジョブが 3 の時は以下のように表示されます。

```
[kinkoh]% bhosts ohara
```

```
HOST_NAME      STATUS      JL/U    MAX  NJOBS   RUN  SSUSP  USUSP   RSV
ohara          ok          -      -     3       3     0     0     0
```

ジョブを投入すると、

Job <34031> is submitted to queue <A>.

のように表示されます。投入したジョブの実行状況を確認するには、

```
[kinkoh]% bjobs
```

と入力します。bjobs は実行待ちと実行中のジョブを表示するコマンドです。

JOBID	USER	STAT	QUEUE	FROM_HOST	EXEC_HOST	JOB_NAME	SUBMIT_TIME
34031	p876543r	PEND	A	kinkoh		* nh3.com	4月 25 12:10

実行待ちジョブは STAT が PEND、実行中のジョブは STAT が RUN となります。終了したジョブは一覧には表示されません。実行待ちのジョブと実行中のジョブは `bkill [JOBID]` として強制終了させることができます。

すべてのジョブが終了すると、

```
No unfinished job found
```

と表示されます。終了済みのジョブの状況を確認するには、

```
[kinkoh]% bjobs -a
```

としてください。

なお、入力ファイルを指定せずにバッチジョブを投入した場合にはエラーメッセージ等を表示することなく実行が終了します。標準出力をファイルとして保存する場合は `bsub` コマンドの `-o` オプションを使用してください。

2 . 実行例

(1)以下の内容のファイル (nh3.com) を用意します (NH3 分子の軌道を計算するための入力ファイルです)。

```
[kinkoh]% cat nh3.com
```

```
%chk=nh3.chk
```

```
#p rhf/3-21g opt
```

```
N
H 1 r21
H 1 r31 2 a312
H 1 r41 2 a412 3 d4123
```

```
r21 1.0
r31 1.0
r41 1.0
a312 109.0
a412 109.0
d4123 120.0
[kinkoh]%
```

(2) バッチジョブ (キューA) として Gaussian 98 を実行します。

```
[kinkoh]% bsub -q A -m ohara_g98_nh3.com
Job <34033> is submitted to queue <A>.
[kinkoh]%
```

(3) 実行の終了を確認します。

```
[kinkoh]% bjobs
JOBID USER      STAT  QUEUE    FROM_HOST  EXEC_HOST  JOB_NAME  SUBMIT_TIME
34034 p873193x RUN   A        kinkoh     ohara      * nh3.com  4月 25 12:25
[kinkoh]%
[kinkoh]% bjobs
No unfinished job found
[kinkoh]%
```

実行が終了すると nh3.log が作成されます。

(4) nh3.log をエディタなどで開き、結果を確認します。

```
[kinkoh]% less nh3.log
```

Gaussian 98 のテストファイルが用意されています。以下のコマンドで各自のホームディレクトリにコピーしてご利用下さい。

```
[kinkoh]% mkdir g98tests
```

```
[kinkoh]% cd g98tests
```

```
[kinkoh]% bsub -lp -m ohara "cp /opt/g98/tests/com/*.com ."
```

3 . Gaussian 98 関連マニュアル一覧

総合情報処理センターでは、以下の Gaussian 98 関連マニュアルを用意しています。必要に応じて貸し出しも行っておりますのでご利用ください。

- Gaussian98 User's Reference Second Edition, Gaussian.Inc.
- Gaussian98 Programmer's Reference, Gaussian.Inc.
- 電子構造論による化学の探求(第二版), ガウシアン社

4 . 関連 URL

Gaussian 98 に関連した URL です。参考にしてください。

Gaussian, Inc. (開発元)

<http://www.gaussian.com/>

東北大学情報シナジーセンター

<http://www.cc.tohoku.ac.jp/service/AP2/soft/gaussian.html>

京都大学化学研究所スーパーコンピュータラボラトリー

<http://www.scl.kyoto-u.ac.jp/scl/appli/g98.html>

by 総合情報処理センター