



Gaussian09,16 ユーザーマニュアル



目次

1	Gaussian について	2
2	Gaussian インストール概要	3
2.1	UNIX/Linux バイナリコード版のインストール	3
2.2	UNIX/Linux ソースコード版のインストール	4
3	Gaussian 実行環境	5
3.1	環境設定ファイル	5
3.2	ユーザー作成における注意点	6
4	Gaussian 実行方法	7
4.1	共有メモリ並列での実行	7
4.2	Linda 並列での実行	8
4.3	GPU を用いた実行 (Gaussian16 以降)	9
5	並列実行における注意点	11
6	トラブルシューティング	12
7	既知の問題点	14
8	ドキュメント・サポート	15
付録 A		16
A.1	HPC システムズ お問い合わせ先	16

1 Gaussian について

Gaussian は Gaussian 社が販売する量子化学計算のアプリケーションです。Unix/Linux , Windows , Mac OS X と多くのプラットフォームで利用できます。

Gaussian 社が現在リリースしている Gaussian を使用するためには Gaussian 社とのライセンス契約が必要です。Gaussian 社のライセンスは以下のように分類されます。

- Gaussian のライセンスはソースコード版とバイナリコード版の 2 種類があります。また、Unix/Linux , Windows , Mac OS X のプラットフォームごとにライセンスが分かれています。
- Gaussian 社のライセンスはサイトライセンスとシングルユーザーライセンスの 2 種類があります。本項で説明する Gaussian Unix/Linux 版はサイトライセンスで販売されています。可視化ソフトの GaussView はサイトライセンスとシングルユーザーライセンスの 2 種類があります。
- Gaussian は使用するリビジョンごとにライセンス契約が必要です。新しいリビジョンの Gaussian がリリースされた際、そのパッケージを使用される場合はアップグレード版のライセンス契約を行う必要があります。

Gaussian のライセンス形態については、計算機へのインストール前に当社営業へご確認頂くことを推奨します。

2 Gaussian インストール概要

本項では当社が行いました Gaussian のインストールについて概説します。Gaussian はバイナリコード版とソースコード版の 2 種類のパッケージがあり、それぞれ以下のようにインストールをしています。

2.1 UNIX/Linux バイナリコード版のインストール

(1) Gaussian をインストールするディレクトリを作成します。

(Gaussian09 の例) /usr/local/gaussian09 リビジョン

(Gaussian16 の例) /usr/local/gaussian16 リビジョン

(2) Gaussian 社から送付された Gaussian バイナリコード版メディアを用意します。

(3) Gaussian 社が案内する手順に添ってインストールします。

2.2 UNIX/Linux ソースコード版のインストール

- (1) Gaussian ソースコード版をコンパイルするためのコンパイラを事前にインストールします。Gaussian のリビジョン毎に推奨するコンパイラのバージョンがあるため、以下バージョンのコンパイラを使用します。

Gaussian Revision	Compiler Version
Gaussian16 Rev. C.02	NVIDIA HPC SDK 21.3 (AVX2, AVX, SSE42, Legacy)
Gaussian16 Rev. C.01	PGI F77 18.10 (AVX2, AVX) PGI F77 17.7 (SSE42, Legacy)
Gaussian16 Rev. B.01	PGI F77 17.7
Gaussian16 Rev. A.03	PGI F77 16.5
Gaussian09 Rev. E.01	PGI F77 15.10
Gaussian09 Rev. D.01	PGI F77 12.10
Gaussian09 Rev. C.01	PGI F77 11.8
Gaussian09 Rev. B.01	PGI F77 10.5
Gaussian09 Rev. A.02	PGI F77 8.0-6

- (2) Gaussian をインストールするディレクトリを作成します。

(Gaussian09 の例) `/usr/local/gaussian09` リビジョン

(Gaussian16 の例) `/usr/local/gaussian16` リビジョン

- (3) Gaussian 社から送付された Gaussian ソースコード版メディアを用意します。

- (4) Gaussian 社が案内する手順に添ってソースコードをビルドしてインストールします。

3 Gaussian 実行環境

3.1 環境設定ファイル

Gaussian を使用するための環境設定は各ユーザーのホームディレクトリのファイルで行っていただきます。

tcsh をご使用の場合は `~/.cshrc`、bash をご使用の場合は `~/.bashrc` ファイル内で `/home/.common` 以下に用意した Gaussian の環境設定スクリプトを実行します。

Gaussian09 の場合)

- ・ Gaussian09 用スクリプト : `/home/.common/00-Gaussian09.csh`
`/home/.common/00-Gaussian09.sh`

Gaussian16 の場合)

- ・ Gaussian16 用スクリプト : `/home/.common/00-Gaussian16.csh`
`/home/.common/00-Gaussian16.sh`

これらのスクリプトでは以下の変数を設定しています。

Gaussian09 の場合)

- ・ Gaussian ディレクトリ `g09root` : `/usr/local/gaussian09` リビジョン
- ・ スクラッチディレクトリ `GAUSS_SCRDIR` : `/scr`

Gaussian16 の場合)

- ・ Gaussian ディレクトリ `g16root` : `/usr/local/gaussian16` リビジョン
- ・ スクラッチディレクトリ `GAUSS_SCRDIR` : `/scr`

3.2 ユーザー作成における注意点

Gaussian を使用するユーザーは Gaussian をインストール時に指定したグループに所属している必要があります。当社では users グループのユーザーが Gaussian を使用できるようにしています。

Gaussian を実行するユーザーを作成する際は root で次のように実行します。

```
# useradd -g users hpc
```

この例ではユーザー hpc を作成します。ユーザー hpc が所属するグループは users です。



ユーザー作成時に users グループに設定しなかった場合、そのユーザーでは Gaussian が動作しません。そのユーザーではログイン時に次のようなメッセージが表示されます。

```
/usr/local/gaussian09c01/g09/bsd/g09.login: Permission denied.
```

この場合は、root で次のコマンドを使用して Gaussian を実行するユーザーのグループを users へご変更下さい。

```
# usermod -g users ユーザー名
```

4 Gaussian 実行方法

4.1 共有メモリ並列での実行

Gaussian で計算を実行される際は共有メモリ並列で行うことをお勧めします。これは複数 CPU コアを搭載した単一の計算機上で使用可能です。通常、並列数を多くするほど計算処理速度が速くなり、計算時間は短縮されます。ユーザーは入力ファイルに並列数を指定するだけで共有メモリ並列での実行を行えます。

Gaussian を共有メモリ並列で動作させる場合は、入力ファイルの冒頭からルートセクションまでの間に、次の指定を行います。

```
%NProcShared=n
```

例えば 8 コア CPU が 2 個搭載された計算機を使用する際は、最大で 16 並列で実行できます。16 並列で実行する場合は入力ファイルに次のように記述します。

```
%mem=1024mw
%NProcShared=16
#p rb31yp/3-21,g force test scf=novaracc

Gaussian Test Job 397:
Valinomycin force
.....
```

次のように実行します。計算結果は `inputfile.log` ファイルに出力されます。

Gaussian09 の場合)

```
$ g09_inputfile.com
```

Gaussian16 の場合)

```
$ g16_inputfile.com
```


計算結果ファイルのファイル名を指定する場合は次のように実行します。

Gaussian09 の場合)

```
$ g09 <_inputfile.com_>_outputfile.log
```

Gaussian16 の場合)

```
$ g16 <_inputfile.com_>_outputfile.log
```

4.2 Linda 並列での実行

Linda は複数台の計算機にまたがって Gaussian の並列計算を行うときに使用するライブラリです。インプットファイルに指定するだけで複数台の計算機を用いる並列計算が行われます。

Gaussian のインプットファイルで Linda 並列の計算させる計算機のホスト名を明示するには、インプットファイルの冒頭からルートセクションまでの間に、次のように記述します。

```
%LindaWorkers=ホスト名:CPU コア数,ホスト名:CPU コア数,.....
```

例えば、それぞれ 16 コアを搭載する計算機の 4 台で 64 並列をさせる場合、次のように %LindaWorkers で使用する計算機のホスト名と CPU コア数を記述します。

```
%mem=1024mw
%LindaWorkers=node01:16,node02:16,node03:16,node04:16
#p rb31yp/3-21,g force test scf=novaracc

Gaussian Test Job 397:
Valinomycin force
.....
```

共有メモリ並列と同様のコマンドで実行します。

Gaussian09 の場合)

```
$ g09_ inputfile.com
```

Gaussian16 の場合)

```
$ g16_ inputfile.com
```



Linda ライブラリについて

Linda ライブラリは Gaussian 社から有償で販売されています。Linda を使用する際は通常の Gaussian とは別に Linda のライセンス契約が必要になりますのでご注意ください。

4.3 GPU を用いた実行 (Gaussian16 以降)

Gaussian16 では Linux 環境下にて、NVIDIA 社の GPU (Graphics Processing Unit) に一部の計算を行わせることが可能です¹。

GPU を使用する場合、各 GPU は特定の CPU コアによって制御されなければなりません。GPU コントローラとして使用される CPU コアは、その Gaussian ジョブの計算用 CPU としては使用できません。また、GPU は制御用 CPU コアを共有できません。

GPU を搭載しているシステム上のハードウェアの位置関係は、`nvidia-smi` コマンドを使用して確認できます。

Gaussian のインプットファイルにおいて、計算に使用する GPU とそれらの制御用 CPU コアを、`%GPUCPU` という Link 0 コマンドで次のように記述します。

```
%GPUCPU=GPU リスト=制御用 CPU コアリスト
```

¹ Gaussian16 Rev. A.03 では Tesla K40 または Tesla K80 が HF 計算と DFT 計算においてサポートされています。Gaussian16 Rev. B.01 ではサポート GPU に Tesla P100 が、C.01 では Tesla V100 が、C.02 では A100 が加わりました。

GPU リストには GPU の番号をカンマ区切りで入力します（0-4,6 というように数値範囲で記述することも可能です）。制御用 CPU コアリストには GPU リストと同じ形式で CPU コアの番号を指定します。2つのリストの中の対応する項目どうしは、GPU とその GPU のための制御用 CPU コアをあらわします。

例えば、6個の GPU と 32 個の CPU コアを有するシステムにおいて、ジョブが全ての CPU（計算を行う 26 個の CPU コアと、GPU を制御するために使用される 0,1,16,17,18,19 番目の計 6 個の CPU コア）を使用する場合は、次のように記述します。

```
%CPU=0-31
%GPUCPU=0-5=0-1,16-19
#p rb31yp/3-21,g force test scf=novaracc

Gaussian Test Job 397:
Valinomycin force
.....
```

共有メモリ並列と同様のコマンドで実行します。

Gaussian16 の場合)

```
$ g16_ inputfile.com
```

5 並列実行における注意点

Gaussian で並列計算をするときは、`%NProcShared` または `%LindaWorkers` の項目をインプットファイルに加える必要があります。ひとつのインプットファイルがいくつかのパートにわかれているときは、その度に指定する必要があります。

以下は Gaussian09 のサンプルジョブの `test571.com` の例です。

```
%NProcShared=2
%chk=test571
#p B3LYP/6-311+G(2d,2p) scf=(tight,novaracc) test

Gaussian Test Job 571 (Part 1):
aspirin gas-phase

0 1
(略)

--Link1--
%NProcShared=2
%chk=test571
%nosave
#p B3LYP/6-311+G(2d,2p) scrf=cosmors guess=read scf=(tight,novaracc) test

Gaussian Test Job 571 (Part 2):
aspirin cosmo/rs input generation

0 1
(略)
```

上記のようにパート毎に `%NProcShared=N` の指定をすると正しく並列実行されます。例えば、下段の `%NProcShared=2` の記述を忘れると、下段の計算時に並列で動作しないのでご注意ください。

Gaussian16 の GPU の使用においても同様にパート毎に指定が必要です。

6 トラブルシューティング

以下に Gaussian の使用時によく起こるエラーについて説明します。

例 1)

```
Error termination via Lnk1e in /usr/local/gaussian09c01/
g09/11.exe at Sat Dec 25 12:32:28 2011.
Job cpu time: 0 days 0 hours 0 minutes 0.0 seconds.
File lengths (MBytes): RWF=      0 Int=      0 D2E=      0
Chk=      0 Scr=      0
```

原因・対策：

- ・ スクラッチディレクトリに書き込みができないことが原因です。
- ・ スクラッチディレクトリの使用率が 100%になっている、スクラッチディレクトリの書き込み権限がない、HDD が故障している、等の原因が考えられます。
- ・ df コマンド等でスクラッチディレクトリをご確認下さい。

例 2)

```
Convergence on wavefunction: 0.0010000000000000
Iteration 1 Dimension 24 NMult 24
CISAX will form 12 AO SS matrices at one time.
Defaulting to unpruned grid for atomic number 44.
Defaulting to unpruned grid for atomic number 44.
Defaulting to unpruned grid for atomic number 44.
Defaulting to unpruned grid for atomic number 44.
Out-of-memory error in routine After all major allocation
(IEnd= 56798894 MxCore= 44622868)
Use %mem=106MW to provide the minimum amount of memory required
to complete this step.
Error termination via Lnk1e in /usr/local/gaussian09c01
/g09/1914.exe at Mon Jan 17 23:17:45 2012.
Job cpu time: 0 days 15 hours 58 minutes 38.3 seconds.
File lengths (MBytes): RWF= 3429 Int= 0 D2E= 0
Chk= 16 Scr= 1
```

原因・対策：

- ・メモリが不足している。
- ・%mem の指定を増やすか %NProcShared の並列数を減らしてください。

弊社では、Gaussian 利用者向けに「Gaussian 計算エラー対処・虎の巻」と題してメールニュースを連載しています。「計算がエラーで止まってしまった！でもどうすればいいかわからない。」や「結果が何かおかしい。どこがいけなかったのだろうか？」といった疑問の解決に少しでもお力添えするべく、よくあるエラーを中心に、直接的な対処法から簡単な理論的背景まで含めて解説しています。トラブルシューティングにどうぞお役立てください。

Gaussian 入門メールニュース

https://www.hpc.co.jp/chem/software/gaussian/gaussian_nyumon/

7 既知の問題点

2022年7月11日現在、Gaussian16 Rev. C.02、Gaussian09 Rev. E.01 で明らかになっている問題点はありません。Bug Fixes についてはリリースノート (<https://gaussian.com/relnotes/>) も参照ください。

8 ドキュメント・サポート

Gaussian の詳細については以下をご確認下さい。

(1) Gaussian Inc. のホームページ

Gaussian のテクニカルサポート情報が公開されています。

<https://gaussian.com/techsupport/>

(2) HPC システムズのホームページ

Gaussian の使用方法等を日本語訳したものを公開しています。

<https://www.hpc.co.jp/chem/software/gaussian/help/>

(3) 電子構造論による化学の探求

計算機化学の入門書です。多くの例題や演習が掲載されており、Gaussian シリーズを用いて作成されています。

https://www.hpc.co.jp/chem/software/gaussian/book_kakaku/

(4) 有機化学のための 量子化学計算入門 – Gaussian の基本と有効利用のヒント –

有機化学のための量子化学計算の入門書です。環境設定から活用方法、困ったときの対応まで、計算例を示しながら具体的に解説しています。

<https://www.hpc.co.jp/chem/software/gaussian/book-quantum-chemical/>

(5) Gaussian Inc. テクニカルサポート

Gaussian 社のサポートにメールで問い合わせできます。

<https://gaussian.com/help/>

付録A

A.1 HPC システムズ お問い合わせ先



弊社ホームページ <https://www.hpc.co.jp/support/>

サポート案内やお問い合わせの多い内容など様々な情報を掲載しております。
是非ご活用ください。

HPC システムズ株式会社

〒108-0022 東京都港区海岸 3-9-15 LOOP-X 8 階

HPC 事業部



【営業】 03-5446-5531 【サポート】 03-5446-5532

お電話によるサポート受付は祝日、弊社指定休日を除く月曜日から金曜日の 9:30～17:30
とさせていただきます。



【FAX】 03-5446-5550



【電子メール】 hpcs_support@hpc.co.jp