



Gaussian09 ユーザーマニュアル



目次

1	Gaussian09 について	2
2	Gaussian09 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	3
3	Gaussian09 実行環境	4
3.1	環境設定ファイル	4
3.2	ユーザー作成	4
4	Gaussian09 実行方法	5
4.1	共有メモリ版並列の実行	5
4.2	Linda 並列の実行 (LindaWorkers の使用)	6
5	並列実行の注意点	7
6	トラブルシューティング	8
7	既知の問題点	10
8	ドキュメント・サポート	11
付録 A	12
A.1	HPC システムズ お問い合わせ先	12

1 Gaussian09 について

Gaussian09 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 Gaussian09 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。

- ・ Gaussian09 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 Gaussian09 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。
- ・ Gaussian09 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 Gaussian09 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。

Gaussian09 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 Gaussian09 インストール概要

本項では当社が行いました Gaussian09 のインストールについて概説します。Gaussian09 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) Gaussian09 をインストールするディレクトリを作成します。

(例) /usr/local/gaussian09 リビジョン

(2) Gaussian 社から送付された Gaussian09 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) Gaussian09 ソースコード版をコンパイルするための PGI コンパイラを事前にインストールします。Gaussian09 のリビジョン毎に推奨する PGI コンパイラのバージョンがあるため、以下バージョンの PGI コンパイラを使用します。

Gaussian09 Revision	PGI Workstation Version
Gaussian09 d01	PGI F77 12.10
Gaussian09 c01	PGI F77 11.8
Gaussian09 b01	PGI F77 10.5
Gaussian09 a02	PGI F77 8.0-6

(2) Gaussian09 をインストールするディレクトリを作成します。

(例) /usr/local/gaussian09 リビジョン

(3) Gaussian 社から送付された Gaussian09 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 Gaussian09 実行環境

3.1 環境設定ファイル

Gaussian09 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 Gaussian09 の環境設定スクリプトを実行します。

以下変数をセットしています。

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

3.2 ユーザー作成

Gaussian09 を使用するユーザーは Gaussian09 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 Gaussian09 を使用できるようにしています。

Gaussian09 を実行するユーザーを作成する際は `root` で以下のように実行します。

```
[root@hpcs01 ~]# 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、そのユーザーはログイン時に以下メッセージが表示され、Gaussian09 は動作しません。

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

この場合は `root` で以下コマンドを使用して Gaussian09 を実行するユーザーのグループを `users` へご変更下さい。

```
[root@hpcs01 ~]# groupmod -g users username
```

4 Gaussian09 実行方法

4.1 共有メモリ版並列の実行

Gaussian09 で計算を実行される際は共有メモリ版並列で行うことをお勧めします。これは Intel アーキテクチャの複数コアをもつ CPU を搭載した計算機にて使用可能です。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。ユーザーはインプットファイルに並列数を指定するだけで共有メモリ版並列での実行ができます。

Gaussian09 を共有メモリ版並列で動作させる場合はインプットファイルのルートセクションに以下の指定を行います。

```
%NProcShared=n
```

例えば 8core の 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インプットファイルに以下のように記述します。

```
%mem=1024mw
%NProcShared=16
#p rb3lyp/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。

```
[hpc@hpcs01 ~]$ g09 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。

```
[hpc@hpcs01 ~]$ g09 < inputfile.com > outputfile.log
```

4.2 Linda 並列の実行 (LindaWorkers の使用)

Linda は Gaussian09 で複数の計算機間で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のルートセクションで指定するだけで、複数の計算機を同時に用いた並列計算が行われます。

Gaussian09 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例です。インプットファイルのルートセクションの `Lindaworkers` で指定します。

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

例えば、計算機 4 台で 64 並列をする場合、インプットファイルのルートセクションの `%LindaWorkers` に以下のように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
.....
```

共有メモリ版と同様のコマンドで実行します。

```
[hpc@hpcs01 ~]$ g09 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 Gaussian09 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。

5 並列実行の注意点

Gaussian09 で並列計算をするときは、ルートセクションに `%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部分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。

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/l1.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 A0 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。
- ・ルートセクションの %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

http://www.hpc.co.jp/gaussian_nyumon.html

7 既知の問題点

2013年10月31日現在、Gaussian09 Rev. D.01 で明らかになっている問題点はありません。

8 ドキュメント・サポート

Gaussian09 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

Gaussian09 のテクニカルサポート情報が公開されています。

http://www.gaussian.com/g_tech/1.htm

(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。

http://www.hpc.co.jp/gaussian_help.html

(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。

<http://kakaku.hpc.co.jp/products/detail/57>

(4) Gaussian Inc. テクニカルサポート

Gaussian 社のサポートにメールでのお問い合わせができます。

http://www.gaussian.com/g_tech/em_help.htm

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 http://www.hpc.co.jp/support_index.html

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