

# Gaussian の使い方

2021年1月現在、東北大学サイバーサイエンスセンター 大規模科学計算システムでは非経験的分子軌道計算プログラム Gaussian16 (C.01) をサービスしております。

ここでは、実際に Gaussian で計算を行う手順を説明します。Gaussian の理論的背景などは、参考資料等を参照ください。

## 1 フロントエンドサーバにログイン

ログインサーバ(login.cc.tohoku.ac.jp)を経由してフロントエンドサーバにログインします。

リモートログインの方法は、

**センターホームページ「利用申請からログインまで」**

**<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/first-use/>**

をご参照ください。

## 2 Gaussian のインプットファイル

Gaussian に与えるインプットファイルを作成する方法は主に 2 通りあります。

1 つは、テキストエディタで計算の操作や基底系、分子構造などを手入力で作成する方法、もう一つは GaussView などの Gaussian プリポストプロセッサにより GUI でデータを作成する方法です。前者については 参考資料[1] 付録 B「Gaussian インプットの概要」等を、後者についてはそれぞれのソフトのマニュアルを参照ください。

インプットファイルを Windows のエディタで作成した場合、FTP ソフトで転送する際には、必ず アスキーモード で転送を行ってください。

また、作成したインプットファイルには、拡張子 **.com** をつけてください。

ここでは、Gaussian に付随している例題ファイル **test0000.com** を例に使用します。例題ファイルは **/mnt/stfs/ap/g16/tests/com** 下にあります。

以下に、Gaussian 用のディレクトリを作成し、例題の test0000.com をコピーする手順を示します。

```
[front1]$ mkdir Gaussian
[front1]$ cd Gaussian
[front1]$ cp /mnt/stfs/ap/g16/tests/com/test0000.com ./
[front1]$ ls
test0000.com
```

test0000.com は水分子の全エネルギーを求めるインプットファイルです。

```
[front1]$ cat test0000.com
# SP, RHF/STO-3G punch=archive trakio scf=conventional

Gaussian Test Job 00
Water with archiving

0 1
0
H 1 0.96
H 1 0.96 2 109.471221
```

#### [並列実行の指定]

センターでサービスしている Gaussian では、128 並列までの並列処理が可能です。大きな分子の解析にぜひご活用ください。

並列で実行するには、**Link 0 section** 行に **%NProc=並列数** を追加してください。手入力の場合は、テキストエディタで先頭行に追加、GaussView 等ではインプットファイル作成画面の **Link 0 section** の項に並列数を追加します。

例) test0000.com を 32 並列で実行する指定をした場合

```
[front1]$ cat test0000.com
%NProc=32
# SP, RHF/STO-3G punch=archive trakio scf=conventional

Gaussian Test Job 00
Water with archiving

0 1
0
H 1 0.96
H 1 0.96 2 109.471221
```

### 3 Gaussian の実行

Gaussian16 は subg16 というコマンドに続けて、キュー名と、拡張子(.com)を除いたインプットファイル名を指定することで、ジョブとして計算が実行されます。

例) Gaussian16(最大 128 コア並列)で、インプットファイル test0000.com を実行する。

```
[front1]$ subg16 -q lx -b 1 test0000
Request 30522.job1 submitted to queue: lx
```

ここで表示される数字(この例では 30522)は リクエスト ID といい、実行状況の表示や実行取消の際に使われます。

Gaussian はアプリケーション用の利用形態に投入します。

(subg16 のコマンド引数に `-q lx -b 1` を指定してください。)

利用形態	利用可能並列数	最大経過時間	メモリ容量	-q オプション	-b オプション
共有	128 コア	既定値/最大値 72 時間/720 時間	256GB	lx	1 (1 ノード実行)

## 4 実行状況の確認

実行状況は `reqstat` コマンドで確認できます。

```
[front1]$ reqstat
Request ID      ReqName  UserName  QUEUE  Pri  STT  S  Memory  CPU  Elaps  R  H  M  jobs
-----
30522.job1     job      x20009    lx      0  RUN  -  732.1B 4235 4236 Y Y Y  1
```

**STAT** が実行状況を示しています。

**RUN** は実行中, **QUE** は待ち状態です。

この場合, リクエスト ID 30522.job のリクエストは実行中です。

計算が終了すると, 再度 `reqstat` コマンドを実行した際,

```
[front1]$ reqstat
Request ID      ReqName  UserName  QUEUE  Pri  STT  S  Memory  CPU  Elaps  R  H  M  jobs
-----
```

このように表示されるか, 他に実行リクエストがある場合, 該当リクエスト ID が一覧表示から消えます。

実行を取り消すには `qdel` コマンドを用います。

```
[front1]$ qdel 30522.job1
Request 30522.job was deleted
```

リクエスト関連のコマンドについては こちらも参照ください。

**センターホームページ**

**「ジョブの実行方法」**

<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/nqs/>

## 5 実行結果

計算が終了すると, インพุットファイル名に拡張子 **.log** がつけられた結果ファイル (例: test0000.log) が作成されます。計算結果をはじめ, CPU 時間などの計算機使用量に関する情報もここに含まれます。

正常終了ならば、このファイルの末尾に「Normal termination of Gaussian 16」というメッセージが出力されます。

ファイルの末尾を表示する **tail** コマンドで確認できます。

```
[front1]$ tail test0000.log
:
Job cpu time: 0 days 0 hours 0 minutes 30.7 seconds.
File lengths (MBytes): RWF= 11 Int= 0 D2E= 0 Chk= 8 Scr= 1
Normal termination of Gaussian 16 ...
```

結果ファイルの詳細な見方は、参考資料等を参照ください。

## 6 ユーティリティプログラム

主なユーティリティプログラムを示します。/mnt/stfs/ap/g16 配下にあります。

chkchk	チェックポイントファイル内のルートセクション（ジョブタイプ、計算手法、用いる基底系）と、タイトルセクション（ジョブタイトル）を抜き出して表示します。
cubegen	チェックポイントファイルから Gaussian Cube 形式のファイルを作成します。
cubman	cube ファイル上で、電子密度や静電ポテンシャル値を操作するのに使います。
formchk	バイナリ形式のチェックポイントファイルをアスキーフォーマットに変換します。
freqchk	チェックポイントファイルから、振動数、熱化学計算のデータを取り出します。
freqmem	振動数計算時に必要とされるメモリー容量を得ることができます。
gauopt	最適化計算を繰り返し行います。
ghelp	Gaussian のオンラインヘルプです。
newzmat	PDB, MOPAC など、各種ファイルフォーマットに対応したファイル変換ツールです。
testrt	input ファイルに用いるルートセクションの記述を試すことができます。記述が誤っている場合はエラーを表示します。
unfchk	(formchk ツールと反対に)アスキーフォーマットのチェックポイントファイルをバイナリ形式に変換します。

それぞれの詳細は 参考文献[2]の「Utility Programs」の章を参照ください。

## 7 Gaussian, GaussView 媒体貸出

Gaussian およびプリポストプロセッサ「GaussView」の媒体を、ご希望の方に配布しております。

お申し込み方法は、

「アプリケーションサービス/Gaussian, GaussView サイトライセンス」

<https://www.ss.cc.tohoku.ac.jp/software-service/>

をご覧ください。

## 8 参考資料

- [1] 電子構造論による化学の探求 第二版,ガウシアン社,1998
- [2] Gaussian プログラムによる量子化学計算マニュアル：堀憲次，丸善出版
- [3] すぐできる量子化学計算ビギナーズマニュアル：武次鉄也，講談社
- [4] すぐできる分子シミュレーションビギナーズマニュアル：長岡正隆，講談社
- [5] Gaussian プログラムで学ぶ情報化学・計算化学実験：堀憲次，丸善出版
- [6] Gaussian, Inc. <https://gaussian.com/>