

【概要】

Gaussian は、多種多様な分子系をモデリングするために設計された量子化学計算ソフトウェアです。様々な半経験的・非経験的量子化学計算法に関する機能を持ち、気相中および溶液中の分子のエネルギー、構造、基準振動など様々な物性予測が可能です。また、基底状態のみならず、励起状態の分子の計算も行えます。

【利用可能ホスト】

malt1.hucc.hokudai.ac.jp (北海道大学に所属する教職員・学生)

malt2.hucc.hokudai.ac.jp (北海道大学に所属する教職員・学生)

malt3.hucc.hokudai.ac.jp (大学に所属する教職員・学生および国または自治体に所属する研究者)

hop000.hucc.hokudai.ac.jp または hop00.hucc.hokudai.ac.jp

hop001.hucc.hokudai.ac.jp または hop01.hucc.hokudai.ac.jp

wine.hucc.hokudai.ac.jp

hopXXX.hucc.hokudai.ac.jp

【リビジョン A.03 の公開】

平成 29 年 3 月 1 日より gaussian16 A.03 を公開しております。

【注意事項】

- 1) Gaussian を利用する場合は利用者番号のグループ登録が必要です。登録は本センター北館ページ (<https://www.hucc.hokudai.ac.jp/>) →ポータルページ→大型計算機システム利用→計算サービス→G a u s s i a n 利用変更→利用変更のプルダウンで「G a u s s i a n を利用する」を選択し、【実行】をクリックします。再度確認画面が表示されますので、また、【実行】をクリックします。
- 2) Gaussian は標準が 1 コアで動作するようになっています。サーバ (またはノード) 内に限り複数コアを指定した並列実行が可能です。アプリケーションサーバは 1 サーバあたり 40 コア、スパコンは 1 ノードあたり 32 コアとなっております。T S S ノード (malt1, malt2, malt3, hop000, hop001, wine) で利用される方は、他のアプリケーションソフトウェア利用者や別の Gaussian 利用者との兼ね合いがありますので、top コマンドで確認しながら節度をもった指定値で利用されるようご協力願います。アプリケーションサーバ (malt1, malt2, malt3) は 1 利用者 1 サーバにつき 16 コアまで、スパコン (hop000, hop001, wine) は 1 利用者 1 サーバにつき 8 コアまでとさせていただきます。それ以上使用される場合はあらか

じめご連絡ください。混雑期はさらにコア数を少なくさせていただく場合があります。なお、上記コアを超えるプログラムが実行されていた場合は nice 値でプライオリティ（優先度）を下げる場合がありますことをご了承ください。

#### 【環境設定ファイルとサンプルプログラムのコピー】

環境設定ファイルとサンプルプログラムが以下にあります。任意のディレクトリにコピーして利用してください。

a) アプリケーションサーバの場合

```
% cp -r /usr/local/huccsrc/g16 .
```

b) スーパーコンピュータの場合

```
% cp -r /opt/common/huccsrc/g16/ .
```

#### 【環境設定】

```
% cd g16
```

```
% source login.g16 ...環境変数の設定
```

#### 【起動方法】

```
% cd sample
```

```
% g16 < test178.com >! test178.log
```

```
% tail test178.log
```

出力の最後に"Nomal termination"と表示されることを確認してください。

#### 【スーパーコンピュータでのバッチジョブの実行方法】

```
% cd g16
```

```
% llsubmit g16.cmd ← バッチノードへの実行依頼
```

```
% llq または llq -u 利用者番号 ← ジョブの実行状況の確認
```

実行が終了するとメールが送信されて来ます。

ジョブコマンドファイルの内容, llsubmit, llq コマンドの使用方法は本センターWeb  
→スーパーコンピュータ→TSS 処理ノードの接続方法とバッチ処理ノード利用例→バッチ  
処理ノードを参照してください。

#### 【ヘルプ】

```
% ghelp
```

【マニュアル】

[Gaussian16 Users Reference](#)

[Gaussian16 IOps Reference](#)

Exploring Chemistry with Electronic Structure Methods

電子構造論による化学の探究 第二版

オンラインマニュアルは[こちら](#)から（大型計算機システム利用者のみ）

【メーカーリンク】

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

<http://www.rsi.co.jp/kagaku/cs/gaussian/>