

《CX400 システムへの Gaussian のバッチジョブの計算依頼方法》

本センターでは、Gaussian は Gaussian09 と Gaussian16 がバッチ処理で利用できます。Gaussian の計算に利用できるシステムは、Intell Haswell CPU を搭載した「CX400/2550 システム」または Intell Ivy Bridge CPU を搭載した「CX400/270 システム」で実行できます。大規模計算や長時間計算に利用される場合は、経過時間制限値が長くとれる「CX400/270 システム」をご利用ください。最大 2 週間まで指定できますが、定期保守を避けてご利用ください。

CX400 システムに Gaussian の計算依頼するときは、表 1 に示す g09sol コマンド及び g16sol コマンドが利用できます。

表 1 計算依頼コマンド一覧とパラメータの設定値

Gaussian バージョン	コマンド名	経過時間 制限値(時間)		ジョブクラス/動作システム		並列 実行数		実行時の CPU の 最適化
		省略値	最大値	省略値		省略値	最大値	
Gaussian09	g09sol	72	336	cx2_single	CX400/270	24		AVX
	g09solcx		72	cx_small	CX400/2550	28		
	g09sols		168	cx_share ^{※1}		14		
	g16sol		336	cx2_single	CX400/270	24		
Gaussian16	g16solavx		72	cx_small	CX400/2550	28		AVX2
	g16solavx2		168	cx_share ^{※1}		14		
	g16sols							

※1) 1/2 ノード(1CPU,64GB)で実行する。

使用方法は、解析入力データが存在するディレクトリに移動し、g09sol コマンド及び g16sol コマンドを入力するだけで CX400 システムに計算依頼することができます。このコマンドを使用すると Gaussian の入力ファイル内の実行環境を定義する“並列数”と“メモリサイズ”ステートメントは、自動的に挿入され、CX400 システムの 1 ノード(96GB メモリ)を占有して計算します (cx_share を除く)。

なお、計算結果を AVS/Express を使って可視化する場合は、Gaussian のルートカードに **IOP(3/24=10)**と、**gfinput** 又は **pop=full** を指定する必要があります(使用例を参照)。

コマンドの形式：

g09sol 入力ファイル名 [経過時間制限値] [並列数] [キュー名]

g16sol 入力ファイル名 [経過時間制限値] [並列数] [キュー名]

入力パラメータの説明を、以下に示します。入力パラメータの省略値は、表 1 を参照してください。

入力ファイル名：

解析入力ファイルの名前を指定します。

経過時間制限値：

計算依頼したジョブの経過時間の制限値を、時間数で指定します。

この値が小さいほど、ジョブの実行開始時刻が早まります。

並列数：

並列実行の数を指定します。

キュー名：

実行するジョブクラス (リソースグループ名) を指定します。

【例 1】 Gaussian09, 実行システム CX400/270, ジョブクラス : cx2-single,
並列数 : 24 , 経過時間制限値 : 72 時間
g09sol ex01.com

【例 2】 Gaussian09, 実行システム CX400/270, ジョブクラス : cx2-single,
並列数 : 24 , 経過時間制限値 : 336 時間
g09sol ex02.com 336

【例 3】 Gaussian16, 実行システム CX400/270, ジョブクラス : cx2-single,
並列数 : 24 , 経過時間制限値 : 72 時間
g16sol ex03.com

【例 4】 Gaussian16, 実行システム CX400/270, ジョブクラス : cx2-single,
並列数 : 24 , 経過時間制限値 : 336 時間
g16sol ex04.com 336

【例 5】 Gaussian16, 実行システム CX400/2550, ジョブクラス : cx-small,
並列数 : 28 , 経過時間制限値 : 72 時間 AVX2 で実行
g16solavx2 ex05.com

【例 6】 Gaussian16, 実行システム CX400/2550, ジョブクラス : cx-small,
並列数 : 28 , 経過時間制限値 : 72 時間 AVX で実行
g16solavx ex06.com

《使用上の留意点》

g09sol コマンド及び g16sol コマンドは、無駄な計算を防ぐために実行中のジョブが次の状況に遭遇したときに、ジョブの再実行を行わないように設定しています。このような場合は、実行結果を確認後、入力データ等を修正し、再度、計算依頼を行ってください。該当するジョブの課金はかかりません。

- ① 2ヶ月に1回程度、スパコンシステムの定期保守を行っています。定期保守を行う時点で、実行中のバッチジョブは実行が中止されます。そのとき実行していたジョブは、再投入をお願いします。
- ② システムクラッシュなどシステムが異常をきたした場合(計算ノード障害等)は、実行中のバッチジョブは実行が中止されます。そのとき実行していたジョブは、再投入をお願いします。

【使用例】

```
[cx001]% g09sol C2H4.com
#####
Input file: C2H4.com
Output file: C2H4.log
Message file: C2H4.msg
CPU number : 24
CPU limit : 72 h
Memory size : 96 gb
Job class : cx2-single
#####
```

```
%nproc=24
%mem=96gb
%chk=C2H4.chk
# rhf/sto-3g opt=z-matrix iop(2/16=1)

ethylene : geometry optimization

0 1
C
C 1 R1
H 1 R2 2 T1
H 1 R2 2 T1 3 D1
H 2 R2 1 T1 3 D2
H 2 R2 1 T1 5 D1

R1 1.3
R2 1.09
T1 120.0
D1 180.0 F
D2 0.0 F

--Link1--
%nproc=24
%mem=96gb
%chk=C2H4.chk
# rhf chkbas scf=tight pop=full geom=checkpoint guess=checkpoint
iop(3/24=10)

ethylene : single point

0 1
```

Gaussian09 入力データ情報

```
[INFO] PJM 0000 pjsub Job 45221 submitted. ... 受付ジョブに関する情報
                        ↑
                    受付ジョブ番号
```

《NQS ジョブの実行の確認方法》

pjstat コマンドを入力すると、スーパーコンピュータ上の利用者のジョブ情報が表示されます。
Web を使った HPC ポータル (<https://portal.cc.nagoya-u.ac.jp>) から、ジョブの状態を確認することができます。

コマンドの形式 :

pjstat

《NQS ジョブのキャンセル方法》

pjstat コマンド等で表示される受付ジョブ番号を pjdel コマンドに指定して、ジョブをキャンセルします。

コマンドの形式 :

pjdel xxxx