

---

富岳商用ソフトウェア  
Gaussian  
利用手順書

2022 年 10 月

版数	更新	作成
第 1.0 版		2022/10/24

---

## 目次

1. まえがき .....	1
2. Gaussian の実行 .....	2
2.1. 入力ファイルにおけるオプションの設定.....	2
2.2. Gaussian 実行時の各種設定について .....	3
2.3. 富岳での実行性能に関する設定 .....	4
3. GaussView の利用方法 .....	4
3.1. GaussView 利用時の各種設定について .....	4
4. Gaussian の環境変更について .....	5
5. 問合せ方法 .....	6
5.1. 富岳サポートサイト問合せ方法 .....	6

---

# 1. まえがき

## 本書の目的

本書では、理化学研究所 計算科学研究センター (R-CCS)がスーパーコンピューター「富岳」上に整備した Gaussian の利用方法を説明します。

- 「富岳」の一般的な利用方法については、富岳ポータル内の各種マニュアルを参照してください
- Gaussian の一般的な利用方法については、Gaussian のマニュアルを参照してください (<https://gaussian.com/man/>)
- 本書の対象は理化学研究所が整備した Gaussian です

## 前提条件

利用者が「[Gaussian の利用申請手続き](#)」に従い Gaussian の利用申請の手続きを実施し、ソフトウェア利用環境設定完了通知を受領しているものとします。

「富岳」上に整備された商用ソフトウェアの利用にあたっては、利用者からのソフトウェア動作に関する問合せ時の調査を、R-CCS および協力機関がソフトウェアベンダーと協力して実施します。そのため、問合せ内容などを R-CCS および協力機関、ソフトウェアベンダー間で相互に共有する場合があります。あらかじめご了承ください。

## 2. Gaussian の実行

計算ノードで Gaussian を実行します。なお、富岳で利用できる Gaussian は、1 ノード内での並列実行のみ可能で、複数ノードをまたぐ並列実行は出来ません。

Gaussian を計算ノードで実行する際は、ジョブ実行用スクリプトを使用します。その例を以下に示します。作業環境に合わせて適宜修正してください。**赤字箇所**については後述の説明文を参照してください。本ジョブは計算ノードに投入します。

```
#!/bin/bash
#PJM -L "rscgrp=small"
#PJM -L "node=1"
#PJM -L "freq=2200,eco_state=2"
#PJM -L "elapse=00:01:00"
#PJM -g <groupname>
#PJM -x PJM_LLIO_GFSCACHE=/vol0004
#PJM -S

module use /vol0004/apps/isv/Gaussian/modulefiles
module load Gaussian

. $g16root/g16/bsd/g16.profile
g16 < 入力ファイル名 >& 出力ログファイル名
```

本ジョブスクリプトは、入力ファイルが格納されたディレクトリと同階層からジョブ投入することを前提としています。

### 2.1. 入力ファイルにおけるオプションの設定

「富岳」での Gaussian 実行において、入力ファイル内で指定するオプションの推奨設定は下記の通りです。オプションの意味や書式の詳細については、Gaussian のマニュアルを参照してください (<https://gaussian.com/man/>)。

- メモリ量の指定

下記を指定することで、並列実行の性能が良くなる場合があります。

```
%mem=16GB
```

- 詳細なログ出力設定

下記の指定により詳細なログ出力が可能です。通常実行時には特に不要ですが、Gaussian の動作について富岳サポートサイトへの問い合わせる際は、これを指定して出力された出力ログファイルを添付することを推奨します。

```
#で始まる行を、#p に変更  
例 : # rhf/sto-3g → #p rhf/sto-3g
```

## 2.2. Gaussian 実行時の各種設定について

- `#PJM -L "freq=2200,eco_state=2"`  
「富岳」の実行モードを指定するオプションです。例ではブーストエコモードを指定していますが、入力データによりエネルギー効率の良い実行モードが異なる可能性がありますので、性能低下が許容範囲で消費エネルギーが最小のモードでの実行をお願いします。詳しくは、下記を参照してください。  
[https://www.fugaku.r-ccs.riken.jp/operation/20220701\\_01](https://www.fugaku.r-ccs.riken.jp/operation/20220701_01)
- `#PJM -x PJM_LLIO_GFSCACHE=/vol0004`  
ジョブ投入時に指定する環境変数 `PJM_LLIO_GFSCACHE` に必ず `/vol0004` を指定してください。
- `module` コマンド  
環境変数を設定するために利用します。
- `module use`  
設定ファイルの格納場所を指定します。変更しないでください。
- `module load modulefile`  
*modulefile* に定義された環境変数群をセットします。

```
module load Gaussian
```

を指定した場合、「富岳」上にインストールされている最新のバージョンを利用します。

**重要** : `module load` コマンドで設定される環境変数には実行時パラメーターが含まれている場合があります。実行時パラメーターを指定する場合、必ず `module load` コマンドより後に指定してください。

特定の製品バージョンを利用する場合、*modulefile* を変更します。

```
例 : g16c01 を使用する場合
```

```
module load Gaussian/g16c01
```

*modulefile* に指定するキーワードは以下のコマンドで確認できます。

```
module use /vol0004/apps/isv/Gaussian/modulefiles
```

```
module avail Gaussian
```

---

module コマンドによって設定される内容は以下のコマンドで確認できます。

```
module use /vol0004/apps/isv/Gaussian/modulefiles  
module show modulefile
```

## 2.3. 富岳での実行性能に関する設定

- ページング方式に関する環境変数

以下のように動的メモリ確保領域を demand に変更した場合、「富岳」での Gaussian の実行性能の向上が期待されます。

```
export XOS_MMM_L_PAGING_POLICY=demand:demand:demand
```

ページング方式についての詳細は[富岳利用手引書](#)、および[プログラミングガイド](#) [プログラム共通編](#)をご参照ください。

## 3. GaussView の利用方法

GaussView 実行コマンド例を以下に示します。作業環境に合わせて適宜修正してください。[赤字箇所](#)については後述の説明文を参照してください。GaussView はプリポスト環境で利用します。下記コマンド実行までの手順は、富岳ポータルの[富岳 可視化 利用ガイド](#)をご参照ください。

```
[PrePost]$ module use /vol0004/apps/isv/Gaussian/modulefiles  
[PrePost]$ module load GaussView  
[PrePost]$ . $g16root/g16/bsd/g16.profile  
[PrePost]$ gv
```

※先頭の「[PrePost]\$ 」はプリポスト環境でのコマンド実行を表します

・参考：描画に問題がある場合、下記の通り環境変数を設定すると解消する事があります。

```
[PrePost]$ export USE_MESAGL=1
```

設定後、再度 gv を実行してください。

### 3.1. GaussView 利用時の各種設定について

- module コマンド

環境変数を設定するために利用します。

- module use

modulefile の格納場所を指定します。変更しないでください。

- module load *modulefile*

---

*modulefile* に定義された環境変数群をセットします。

```
module load GaussView
```

を指定した場合、「富岳」上にインストールされている最新のバージョンを利用します。

重要：`module load` コマンドで設定される環境変数には実行時パラメーターが含まれている場合があります。実行時パラメーターを指定する場合、必ず `module load` コマンドより後に指定してください。

特定のバージョンを利用する場合、*modulefile* を変更します。

例：6.1.1 を使用する場合

```
module load GaussView/6.1.1
```

*modulefile* に指定するキーワードは以下のコマンドで確認できます。

```
module use /vol0004/apps/isv/Gaussian/modulefiles  
module avail GaussView
```

`module` コマンドによって設定される内容は以下のコマンドで確認できます。

```
module use /vol0004/apps/isv/Gaussian/modulefiles  
module show modulefile
```

## 4. Gaussian の環境変更について

Gaussian の環境変更が行われる場合、変更内容と日時が「富岳」利用者ポータルサイトに掲載されます。変更内容を確認し、必要に応じて変更日時までに対応を実施してください。以下に想定される変更内容と、その変更による利用者への影響および対処方法を記します。

- Gaussian のバージョンアップ

`module load Gaussian` を指定して最新バージョンを利用している場合、変更日時以降実行される Gaussian のバージョンが新たに導入される最新バージョンに変更されます。現在使用しているバージョンを継続して使用する場合は、`module load` の指定に `/製品バージョン` を追加してください。

- Gaussian の特定バージョン削除

削除対象のバージョンを `module load` で指定している場合、変更日時以降 Gaussian が利用できなくなります。`module load` の設定を変更して別のバージョンを使用してください。

---

## 5. 問合せ方法

富岳における理化学研究所が整備した Gaussian に関するお問い合わせは、富岳サポートサイトにお問い合わせください（詳細は 5.1 節をご覧ください）。

Gaussian の一般的な使い方については、Gaussian のマニュアルを参照してください（<https://gaussian.com/man/>）。

### 5.1. 富岳サポートサイト問合せ方法

富岳サポートサイト（<https://fugaku.zendesk.com/hc/ja/requests/new>）にアクセス後、下記の要領でお問い合わせ願います。

- 「以下の中から該当する問題を選択してください」：プルダウンメニューで「アプリケーションソフトウェア」を選択してください。
- 「課題 ID」：プルダウンメニューで、お問い合わせの内容に関連する課題 ID を選択してください。
- 「お問い合わせ種別」：プルダウンメニューで、「商用アプリケーション」を選択してください。
- 「件名」：お問い合わせ内容に関する件名を記入してください。
- 「利用者氏名」：お問い合わせされる方の氏名を記入してください。
- 「アカウント名」：お問い合わせされる方のアカウント名を記入してください。
- 「アプリケーション名」：「Gaussian」と記入してください。
- 「お問い合わせ詳細」：お問い合わせ内容を記入してください。
- 「添付ファイル」：Gaussian の動作に関するお問合せの場合は、実行時のログファイルをご提供頂けるとスムーズな調査が可能です。「2. Gaussian の実行」のスクリプトの例に記載している出力ログファイルの添付もご検討ください。なお、ログファイル出力の設定については、2.1 節の「詳細なログ出力設定」をご参照ください。