

化学コース共用計算機を用いた Gaussianの流し方

理論・計算化学研究室

2008-2012 初版(本田康)

2012 改訂(阿部穰里)

2013 改訂(阿部穰里,河村俊秋)

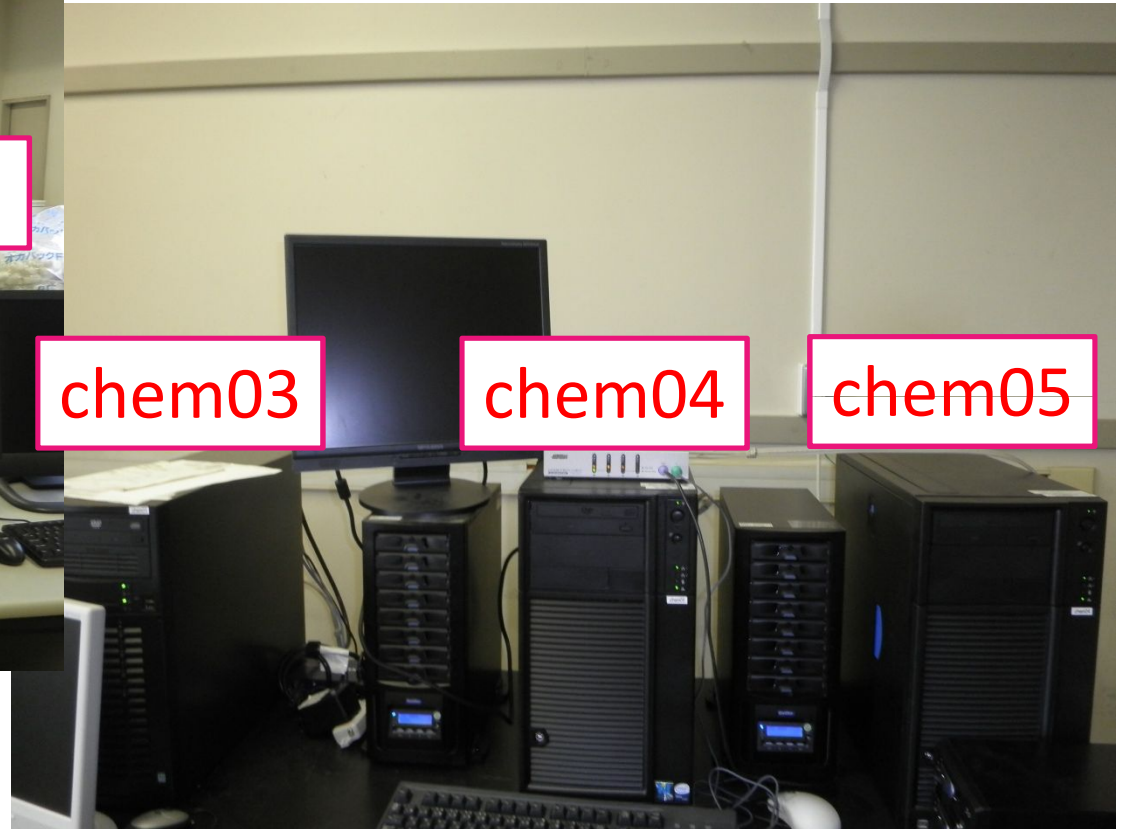
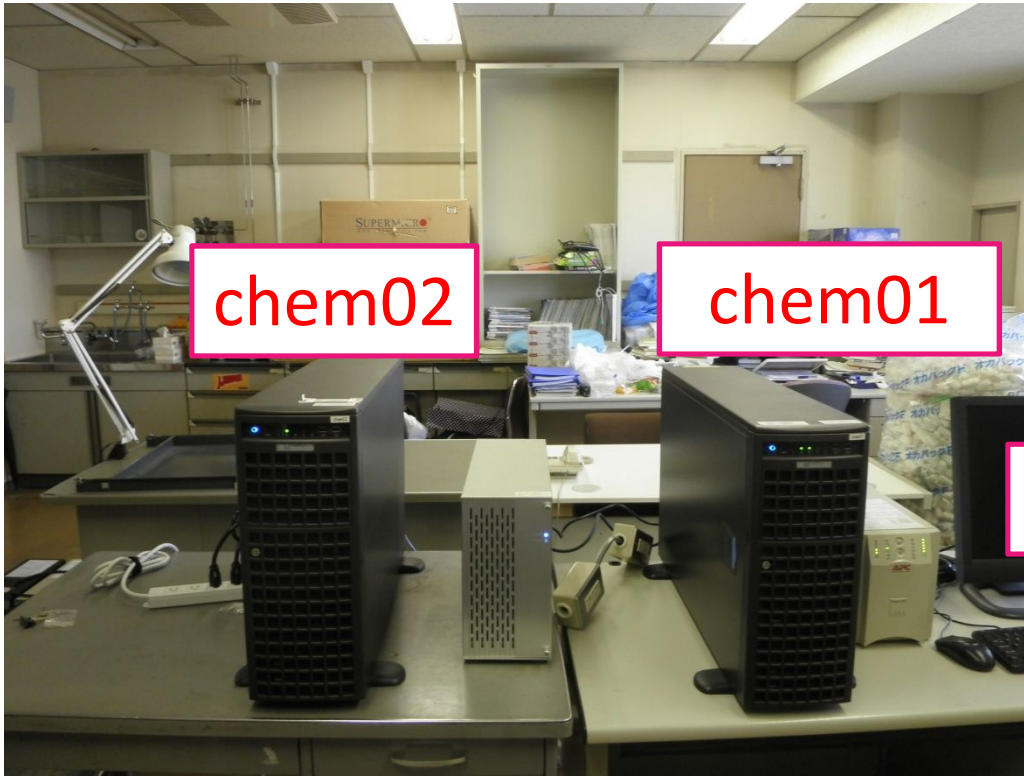
http://www.comp.tmu.ac.jp/chem_comp/chem_kanri.html

管理者: 阿部穰里 吉澤輝高 河村俊秋

概要

- 化学コース計算機(chemシリーズ)の基本性能
 - － CPU、メモリ、ハードディスク構成
- 計算機利用にあたっての事前準備
 - － ユーザ登録
 - － 各自のパソコン側で必要な事項
- ユーザID取得後、まず最初にすべきこと
 - － ログイン方法
 - － パスワードの変更
- 計算機の基本的な使い方と運用システム
 - － chemシリーズでのGaussian03,Gaussian09の使い方
 - － ジョブ運用システム:LSF (Load Sharing Facility) の概要
 - － LSFの基本的コマンド
- Gaussian03,Gaussian09の実際の計算手順
- 注意事項など

化学コース計算機 chem01～chem05



547号室に設置している

Chem01, Chem02が最新、Chem03は貧弱、
Chem04, Chem05は以前最新だったもの

化学コース計算機の基本性能

ホスト名	CPU	CPU 速度 (GHz)	Core 総数	Memory (GB)	HDD	Size	HDD	Size
chem01	Xeon X5690	3.47	12	96	/home	8TB	/scr	2TB
chem02	Xeon X5690	3.47	12	96	/scr	2TB		
chem03	Xeon W3520	2.67	4	6				
chem04	Xeon E5410	2.33	8	16	/work	500GB	/scr	1TB
chem05	Xeon E5450	3.00	8	16	/scr	500GB	/data	3.5TB

Chem01,Chem02が最新、Chem03は貧弱、Chem04,Chem05は以前最新だったもの 4

計算機利用にあたっての事前準備 ①

● ユーザ登録

計算機利用にはユーザ登録が必要です。
希望者は研究室、氏名、学籍番号(または身分)、
メールアドレス、希望IDを明記して、
阿部穰里(minoria@tmu.ac.jp)にご連絡ください。

ユーザ登録が完了すると、
ログイン名、初期パスワードが与えられます。

またユーザーはメーリングリスト
(chemcomputer-ml@ml.tmu.ac.jp)に加入していただき、
計算機の情報(リリースや停電等)を管理者から配信します。⁵

計算機利用にあたっての事前準備 ②

- 各自のパソコン側で必要な事項（Windowsの場合）

◆ TTSSH, WinSCPのインストール

<http://ttssh2.sourceforge.jp/>



<http://winscp.net/eng/docs/lang:jp>



WinSCP

◆ パソコン版/ Gaussian09, GaussViewのインストール

必須ではありませんが、Linux版に慣れてない人はインストールをお勧めします。

*インストールCDの貸出は、化学コース事務室まで

ユーザID取得後は...

● 計算機にログイン

学内のパソコン上で TTSSHを立ち上げ、ホスト名の欄に

133.86.68.69

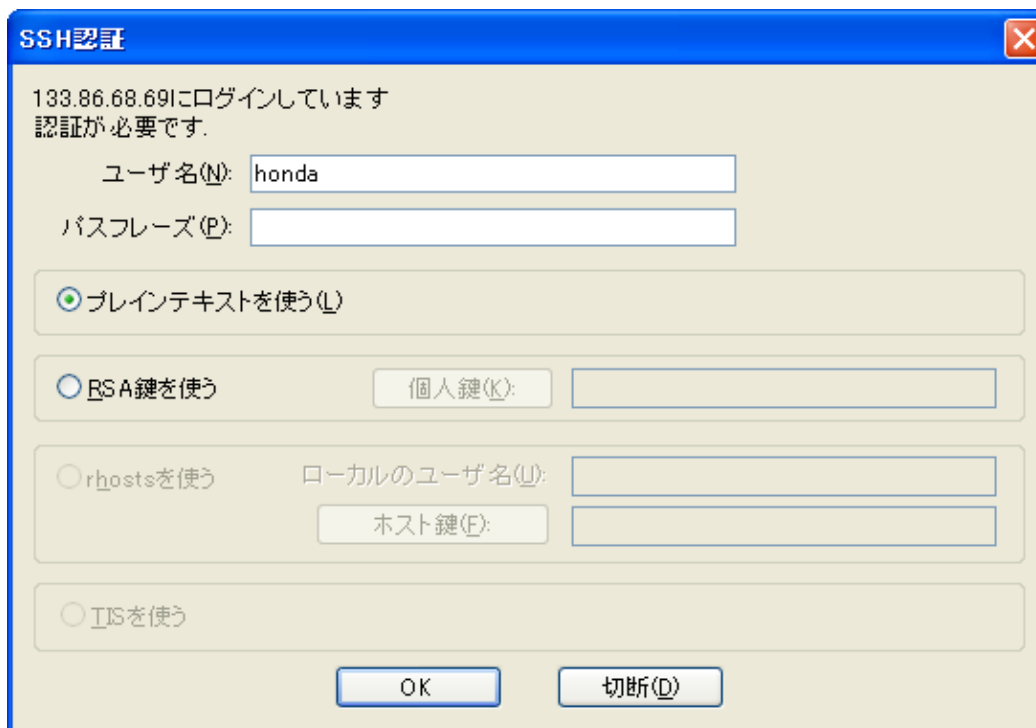
と打ち込む。

それ以外の設定は、下のウィンドウの通り。



ユーザID取得後は... その2

すると、下のようなウィンドウが現れるので、取得したログイン名とパスワードを入力する。



The screenshot shows an SSH authentication window titled "SSH認証". The window contains the following elements:

- Text: "133.86.68.69にログインしています 認証が必要です。"
- Text input field: "ユーザ名(N): honda"
- Text input field: "パスワード(P):"
- Radio button: "ブレインテキストを使う(L)" (selected)
- Radio button: "RSA鍵を使う" with a text input field "個人鍵(K):"
- Radio button: "rhostsを使う" with text input fields "ローカルのユーザ名(U):" and "ホスト鍵(E):"
- Radio button: "TISを使う"
- Buttons: "OK" and "切断(D)"

上手くログインできれば、下のようなプロンプトが現れる。

chem01:<ユーザー名>\$

ログインが成功したら、直ちにパスワードの変更を行う。

ユーザID取得後は... その3

● パスワードの変更

パスワード変更するには、下のコマンドを打ち込む。

yppasswd

現在のパスワード、新パスワード(確認のため2回入力)を打ち込み、パスワード変更が成功すればその旨のメッセージが表示される。

```
chem01:<ユーザー名>$ yppasswd
Changing NIS account information for ログイン名 on chem00.chem.metro-u.ac.jp.
Please enter old password:
Changing NIS password for ログイン名 on chem00.chem.metro-u.ac.jp.
Please enter new password:
Please retype new password:

The NIS password has been changed on chem00.chem.metro-u.ac.jp.
```

(パスワード変更は、最初のログイン時に必ず行ってください。)⁹

Gaussian09の実際の計算手順

① パソコンでGaussian入力ファイルを作成

② WinSCPでchem01(133.86.68.69)にアクセス → 入力ファイルをchem01の以下の場所に転送
`~/g03jobs`

③ TTSSHで
133.86.68.69にログイン

g03jobsディレクトリに移動
`cd g03jobs`

Gaussian計算ジョブを投入
`g09job` 入力ファイル 出力ファイル

④ ジョブの状況を確認
`list`

Chkファイルをパソコンで読み込めるように、Fchkファイルに変換
`formchk chkファイル`

⑤ 計算が終了したら、g03jobs内の出力ファイル (`~.out`) とFchkファイル (`~.fchk`) をWinSCPでパソコンにダウンロード

パソコンのGaussViewなどで計算結果を解析

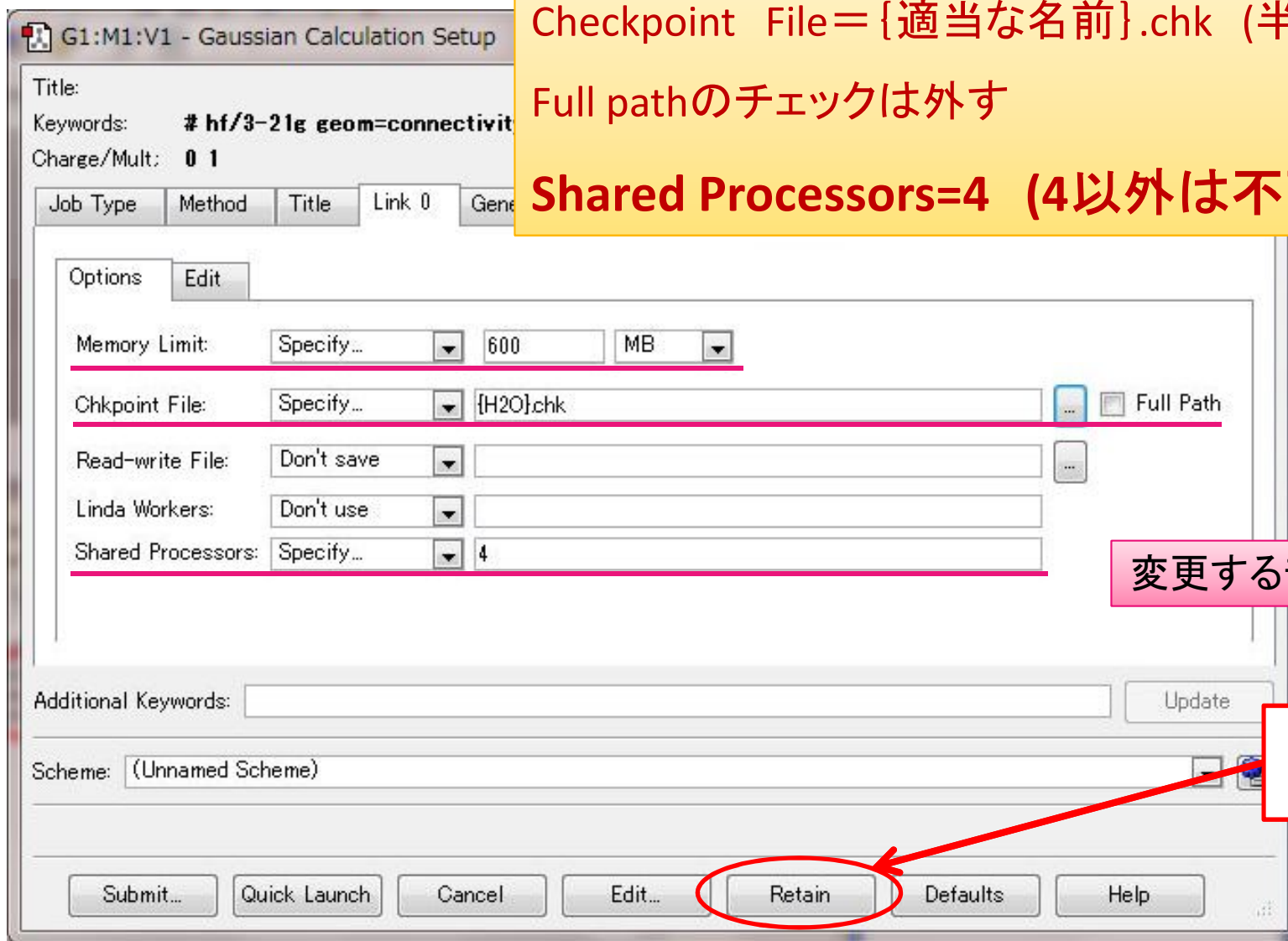
①パソコンでGaussian入力ファイルを作成

Memory Limit=適当量 (こだわりがなければ6 GB)

Checkpoint File={適当な名前}.chk (半角英数字のみ)

Full pathのチェックは外す

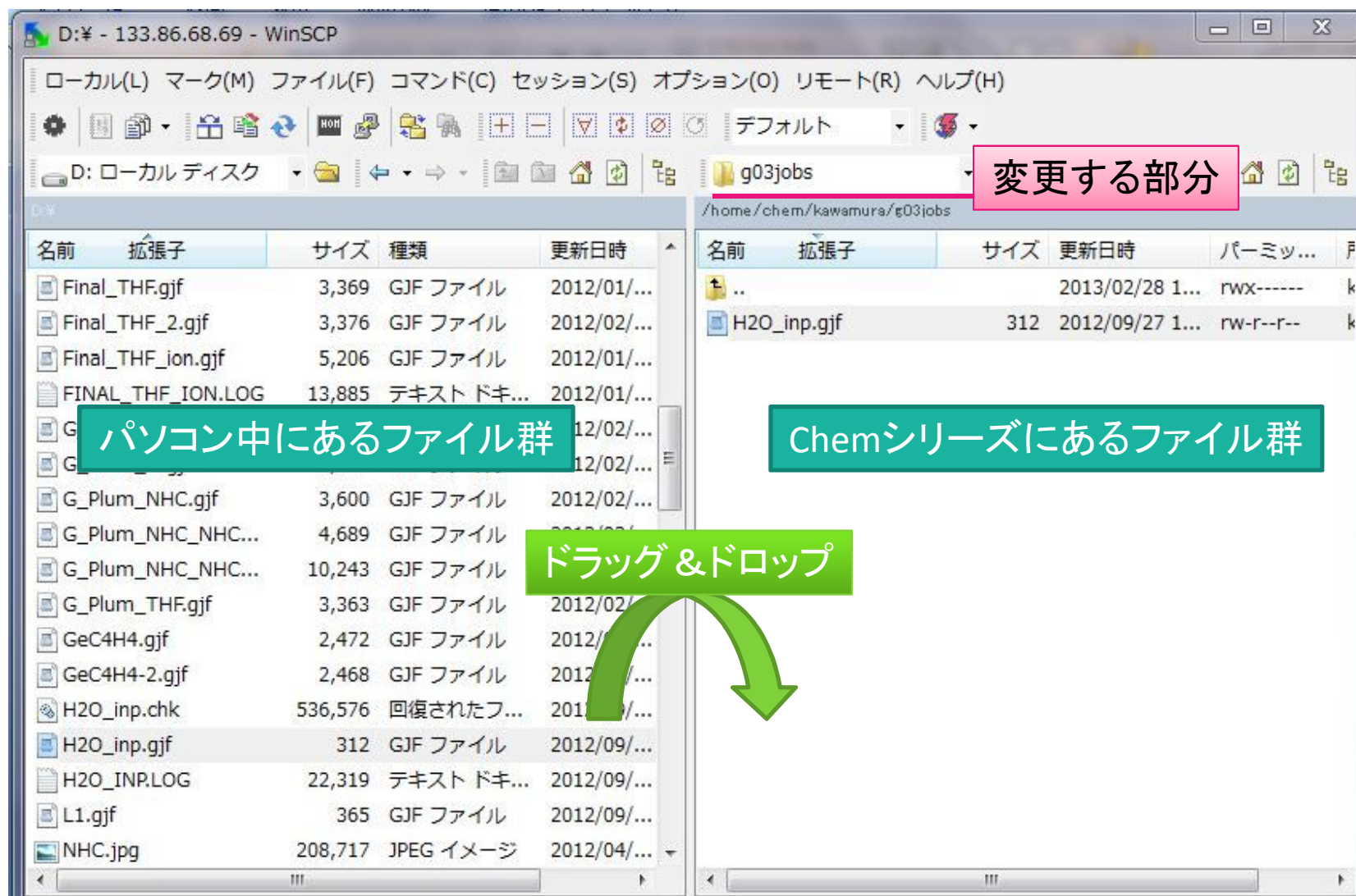
Shared Processors=4 (4以外は不可)



変更する部分

Retain後にファイルから名前を付けて保存

② WinSCPでchem01(133.86.68.69)にファイルの転送



③ 計算機にジョブの投入

P7,8に見習い、TTSSHで133.86.68.69にログイン(略)

ログイン後

紫: ユーザー

青: 計算機からの応答

chem01:<ユーザーID >% cd g03jobs ←

ディレクトリの移動

/home/chem/ユーザーID /g03jobs ←

移動した場所の確認

chem01:<ユーザーID >% ls ←

ディレクトリ内のファイル参照

H2O.gjf ←

ファイル確認

chem01:<ユーザーID >% g09job H2O.gjf H2O.out ←

ジョブの投入

Job <4603> is submitted to default queue <normal>. ←

ジョブ投入の確認

chem01:<ユーザーID >%list ←

ジョブの進行状況の確認

③ジョブ投入まとめ

- chem シリーズでの Gaussian09 の使い方

G09入力ファイルを計算機で実行させるには、**g09job**コマンドを使う。
コマンド書式は、

g09job 入力ファイル名 出力ファイル名

実際には、下のような感じでコマンド入力する。

g09job h2o.gjf h2o.out

こうするとそのジョブは、あいているマシンに自動的に割り振られる。
計算結果のファイルは、各自の g03jobs ディレクトリ内に生成される。

下のように指定すると、そのジョブは必ず chem01 で実行される。

g09job h2o.gjf h2o.out chem01

G03で流したいときは、g03jobコマンドを使う。

g03job h2o.gjf h2o.out

④ 計算状況の確認とシステム

● ジョブ運用システム: LSF の導入

chemでは多人数のユーザがなるべく平等かつ円滑にジョブを走らせられるように、LSF (Load Sharing Facility) というシステムを導入している。

LSFとは簡単に言うと**ジョブの順番待ち制御システム**である。

✓ 1ユーザが同時に計算できるのは、合計で**3ジョブ**

4ジョブ目を投入すると、そのジョブはいわゆる「**順番待ち**」状態となり、前のジョブが終わるまで稼動しない。

前のジョブが終了すると、「**順番待ち**」ジョブのうち、先に投入されたジョブから「**稼動**」状態となる。

④ 計算状況の確認とシステム その2

- chem シリーズにおける LSF の基本的コマンド

list (現在の計算稼働状況を表示する)

list と打つと、例えば下のようなリストが表示される。

JOBID	USER	STAT	QUEUE	FROM_HOST	EXEC_HOST	JOB_NAME	SUBMIT_TIME
1260	aaa	RUN	normal	chem01.chem	4*chem02.ch	job001.chk	May 15 11:00
1261	aaa	RUN	normal	chem01.chem	4*chem01.ch	job002.chk	May 15 11:01
1263	bbb	RUN	normal	chem01.chem	4*chem02.ch	optAA.chk	May 15 13:00
1264	ccc	RUN	normal	chem01.chem	4*chem01.ch	nmrBB.chk	May 15 13:38
1262	aaa	PEND	normal	chem01.chem		job003.chk	May 15 11:02

この状況で、dddさんが `g03job test.gjf test.out` とジョブ投入すると...

JOBID	USER	STAT	QUEUE	FROM_HOST	EXEC_HOST	JOB_NAME	SUBMIT_TIME
1260	aaa	RUN	normal	chem01.chem	4*chem02.ch	job001.chk	May 15 11:00
1261	aaa	RUN	normal	chem01.chem	4*chem01.ch	job002.chk	May 15 11:01
1263	bbb	RUN	normal	chem01.chem	4*chem02.ch	optAA.chk	May 15 13:00
1264	ccc	RUN	normal	chem01.chem	4*chem01.ch	nmrBB.chk	May 15 13:38
1262	aaa	PEND	normal	chem01.chem		job003.chk	May 15 11:02
1265	ddd	PEND	normal	chem01.chem		test.chk	May 15 18:30

④計算状況の確認とシステム その3

• g03kill (Job ID) (提出したG03ジョブをキャンセルする)

下の計算稼働状況で、aaaさんが g03kill 1260 (g09で計算してても g03killです) と打つと...

JOBID	USER	STAT	QUEUE	FROM_HOST	EXEC_HOST	JOB_NAME	SUBMIT_TIME
1260	aaa	RUN	normal	chem01.chem	4*chem02.ch	job001.chk	May 15 11:00
1261	aaa	RUN	normal	chem01.chem	4*chem01.ch	job002.chk	May 15 11:01
1263	bbb	RUN	normal	chem01.chem	4*chem02.ch	optAA.chk	May 15 13:00
1264	ccc	RUN	normal	chem01.chem	4*chem01.ch	nmrBB.chk	May 15 13:38
1262	aaa	PEND	normal	chem01.chem		job003.chk	May 15 11:02
1265	ddd	PEND	normal	chem01.chem		test.chk	May 15 18:30

ジョブ1260がキャンセルされ、順番待ち状態のうち、dddさんのジョブ1265が稼働開始となる。

JOBID	USER	STAT	QUEUE	FROM_HOST	EXEC_HOST	JOB_NAME	SUBMIT_TIME
1261	aaa	RUN	normal	chem01.chem	4*chem01.ch	job002.chk	May 15 11:01
1263	bbb	RUN	normal	chem01.chem	4*chem02.ch	optAA.chk	May 15 13:00
1264	ccc	RUN	normal	chem01.chem	4*chem01.ch	nmrBB.chk	May 15 13:38
1265	ddd	RUN	normal	chem01.chem	4*chem02.ch	test.chk	May 15 18:30
1262	aaa	PEND	normal	chem01.chem		job003.chk	May 15 11:02

⑤ 計算終了の確認

list後 JOBID : 1260, USER : aaaが無くなっている = 計算が終わっている

JOBID	USER	STAT	QUEUE	FROM_HOST	EXEC_HOST	JOB_NAME	SUBMIT_TIME
1261	aaa	RUN	normal	chem01.chem	4*chem01.ch	job002.chk	May 15 11:01
1263	bbb	RUN	normal	chem01.chem	4*chem02.ch	optAA.chk	May 15 13:00
1264	ccc	RUN	normal	chem01.chem	4*chem01.ch	nmrBB.chk	May 15 13:38
1262	aaa	PEND	normal	chem01.chem		job003.chk	May 15 11:02
1265	ddd	PEND	normal	chem01.chem		test.chk	May 15 18:30

chem01:<ユーザーID>% ls

← デレクトリの確認

4603.out H2O.chk H2O.fchk H2O.gjf H2O.out

← ファイル確認

4603.out : 計算記録

H2O.chk : チェックポイントファイル

H2O.fchk : Fチェックポイントファイル

H2O.gjf : インプットファイル

H2O.out : アウトプットファイル

← 計算機の間を超えて互換性のあるファイル

⑤ WinSCPでchem01(133.86.68.69)からファイルの転送

g03jobs - 133.86.68.69 - WinSCP

ローカル(L) マーク(M) ファイル(F) コマンド(C) セッション(S) オプション(O) リモート(R) ヘルプ(H)

D: ローカル ディスク g03jobs **変更する部分**

名前	拡張子	サイズ	種類	更新日時
Final_THF.gjf		3,369	GJF ファイル	2012/01/...
Final_THF_2.gjf		3,376	GJF ファイル	2012/02/...
G_Plum_2-.gjf		5,421	GJF ファイル	2012/02/...
G_Plum_N.gjf		5,230	GJF ファイル	2012/02/...
G_Plum_NHC.gjf		3,600	GJF ファイル	2012/02/...
G_Plum_NHC_NHC...		4,689	GJF ファイル	2012/02/...
G_Plum_NHC_NHC...		10,243	GJF ファイル	2012/02/...
G_Plum_THF.gjf		3,363	GJF ファイル	2012/02/...
GeC4H4.gjf		2,472	GJF ファイル	2012/02/...
GeC4H4-2.gjf		2,468	GJF ファイル	2012/02/...
H2O_inp.chk		536,576	回復されたフ...	2012/09/...
H2O_inp.gjf		312	GJF ファイル	2012/09/...
H2O_INP.LOG		22,319	テキスト ドキ...	2012/09/...
L1.gjf		365	GJF ファイル	2012/09/...
NHC				/04/...

Gaussviewで解析するのに必要なファイル

ドラッグ & ドロップ

パソコン中にあるファイル群

Chemシリーズにあるファイル群

名前	拡張子	サイズ	更新日時	パーミッ...
..			2013/03/01 1...	rw-x-----
H2O.out		33,135	2013/02/28 1...	rw-r--r--
4603.out		1,061	2013/02/28 1...	rw-r--r--
H2O.gjf		296	2013/02/28 1...	rw-r--r--
H2O.fchk		17,133	2013/02/28 1...	rw-r--r--
H2O.chk		638,976	2013/02/28 1...	rw-r--r--

流し方のまとめ

- PCでインプットファイルを作成し、Chemに転送
- TTSSHで
 - ✓ g03jobsディレクトリに移動 (`cd ~/g03jobs`)
 - ✓ g03jobまたはg09jobコマンドで計算を流す
(`g09job h2o.gjf h2o.log chem01`)
 - ✓ listで計算状況を確認
 - ✓ 間違ったジョブはg03kill (ジョブ番号)で取り消し
 - ✓ lsでアウトプットやfchkができているか確認
 - ✓ lessやviで計算結果の確認
- PCに転送、Gaussviewなどで解析

注意事項(メモリの指定)

ホスト名	CPU速度	Core総数	Job数	Memory (GB)
chem01	3.47	12	2	96
chem02	3.47	12	3	96
chem03	2.67	4	1	6
chem04	2.33	8	2	16
chem05	3.00	8	2	16

4 core並列しか動かない設定
同時に流れるジョブの数=コア数/4

ただしChem01は、
home directlyを兼ねているため
2ジョブしか流れない。

1ジョブあたりに使えるメモリ

Chem01 → 48GB

Chem02 → 32GB

Chem03 → 6GB

Chem04,05 → 8GB

21

マシンを指定して流すことを条件に、上記のメモリサイズで計算を流してよい。ただしマシンの指定を間違えないように！(壊れるおそれあり)

注意事項(学外からのアクセス)

学外から、Chemには直接アクセスできません。

ただし情報処理システムのアカウントを持っている人は、そこを経由すればアクセスできます。情報処理システムの適当なサーバにログインし、そこから

`ssh ログイン名@133.86.68.69`

と打てば、アクセスできます。

ファイルの転送はTTSSH内で

`scp (ファイル名) (ログイン名)@133.86.68.69:~/g03jobs`

とします。

参考書など

- 人に聞けないUNIXの使い方
(アスキー出版)
- Gaussianプログラムで学ぶ情報化学・計算化学実験
堀憲次・山本豪紀 著(丸善)
- すぐできる量子化学計算 ビギナーズマニュアル
平尾公彦 監修、武次徹也 著(講談社サイエンティフィク)

困ったときは

- 問い合わせ先
8号館571号室(3582)
理論・計算化学研究室 阿部穰里まで minorioria@tmu.ac.jp