

gsub (Open OnDemand)

Gaussian??????

Gaussian?????????????????????????

1. ??????: ??????????????????????????
2. Gaussian?: ??????????????????????????

?????????????????????????????????

データ準備

こちらのページを参照してください。

Gaussian設定

入力ファイル設定

? ??????

- 選択方法: 「参照」ボタンでファイルブラウザを使用、または直接パス入力
- プレビュー機能: ファイル選択後、内容が自動的にプレビュー表示

? ??????

- 統合エディタ: 「編集」ボタンをクリックして入力ファイルを直接編集
- 保存: 「保存」ボタンをクリック

入力ファイル

Gaussian入力ファイル

Gaussianの入力ファイル (.comまたは.gjf) のパス

```
#p rb3lyp/3-21g force test scf=novaracc

Gaussian Test Job 397:
Valinomycin force

0,1
0,-1.3754834437,-2.5956821046,3.7664927822
0,-0.3728418073,-0.530460483,3.8840401686
```

```

1 #p rb3lyp/3-21g force test scf=novaracc
2
3 Gaussian Test Job 397:
4 Valinomycin force
5
6 0,1
7 O, -1.3754834437,-2.5956821046,3.7664927822
8 O, -0.3728418073,-0.5304664843,3.8840401686
9 O, 0.2.3301399394,0.5231526187,1.7996834334
10 O, 0.2842272248,2.513641605,-0.2483875054
11 O, 0.2.3870396194,3.3004886604,0.2860546915
12 O, 0.3.927241841,1.9677029583,-2.7261655162
13 O, 0.2.2191878407,-1.06738595692,-2.0338343532
14 O, 0.4.280257915,-1.2459024314,-3.1616013359
15 O, 0.1.7622263124,-1.2194205092,-5.8516871343
16 O, 0.1.0363626567,3.1095923678,-3.7084594295
17 O, 0.0.2466786219,0.966598651,-3.8828785542
18 O, -0.2.55862828262,-0.0906355161,-1.9360823389
19 O, -0.3281133832,-2.3890727819,0.2344263336

```

キャンセル 保存

Gaussianバージョン選択

? ??????????

Gaussian 16, Gaussian 09

? G16???????

Gaussian 16選択時に以下のリビジョンから選択 :

c02, c01, b01



計算リソース設定

? ジョブタイプ選択

標準計算

- 1-64、128コア

大容量メモリ計算

- 標準計算ではメモリ不足の時に使用
- 64コアまたは128コアのみ選択可能

GPU計算

- あまり速くならないため非推奨
- GPU1基あたり最大16コア。最大128コア。

? CPUコア数設定

- プリセット選択 : 1, 4, 8, 16, 32, 64, 128コア
- 手動入力 : 入力フィールドで任意のコア数を指定

? GPU設定 (GPU計算選択時) : 1-8?????

? 実行時間設定 : ??????????????

? ストレージオプション

- スクラッチ領域として大容量の/gwork使用
- 速度は少し落ちる。

計算リソース設定

Job Type 標準計算

標準的なGaussian計算

CPUコア数

1	4	8	16	32
64	128			

8

1から64までの値、または128を選択できます

最大実行時間

72	0	0
時間	分	秒

大容量スクラッチ領域を使用
低速だが大容量のスクラッチ領域を使用します。大規模計算に適しています。

詳細設定

詳細設定 (オプション)

「詳細設定」をクリックして展開すると以下の設定が可能です :

? 通知設定 : ??????????????

? ??????????????????????????????????

? ジョブ名設定

- 任意のジョブ名を設定
- 空白の場合は入力ファイルから自動生成
(例 : test0397.com → test0397)

詳細設定

^

メール通知を送信

ジョブの開始時と終了時にメール通知を受け取ります

既存ファイルを上書き

同名のファイルが存在する場合に上書きします

ジョブ名 (任意)

未指定の場合は入力ファイル名から自動

ジョブの識別に使用する名前（省略可）

ジョブ投入

「ジョブを投入」ボタンをクリック

 ジョブ投入

以上の設定でGaussianジョブを投入します。よろしければ「ジョブを投入」ボタンをクリックしてください。

 ジョブを投入