gsub (Open OnDemand)

Gaussianジョブの投入

Gaussianジョブ投入は以下の2つのステップで行います:

- 1. データ準備:作業ディレクトリの設定、入力ファイルの準備
- 2. Gaussian設定: インプットの選択・編集、計算リソースの設定、投入

各ステップは画面上部のタブで切り替えることができます。

## 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

#### ■ ファイル選択

- 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

#### ■ ファイル編集

- 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

<ul> <li>入力ファイル</li> </ul>	
Gaussian入力ファイル ~/ccood_job/test/ ] 参照 ♪ 編集 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	χ         test8397.com           1         #prb33/p/5-21g force test scfmovaracc           2         Gaussian Test 2.06 M97:           3         Villomyclon force           8         01.3734834472.358462104.5.37664497822           9         0.0.3381089334.6.531352817.1.779664937954           10         0.0.318728495.1.877405483437.2726153122           10         0.0.3197295134.3.187740545.3.726151321           10         0.0.3197395134.3.187740545.3.726151321           10         0.0.3197395134.3.187785554           11         0.0.119874807.1.187788959.7.2181391351           12         0.4.67795151.3.125795951.3.189779554           13         0.0.723591343.1.187785555.1.318077535           14         0.4.7235911348.3.2.7.318977957854           15         0.4.723591134832.7.3.1897795584           16         0.7.258672875.9.3696727815.9.8234263336

┃ Gaussianバージョン選択

■ 利用可能バージョン

#### Gaussian 16, Gaussian 09

#### ■ G16リビジョン選択

Gaussian 16選択時に以下のリビジョンから選択:

#### c02, c01, b01

g16c02 (C.02) ・ Gaussian 16のリビジョンを選択します。		
<b>((</b>		

#### ■ 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基から設定
- 実行時間設定:時間・分・秒で個別に設定
- 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			
СРU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。				
② 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:開始・終了時にもメール通知
- 既存ファイルの上書:同名のファイルが存在する場合の動作を設定
- 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

 $\wedge$ 

# □ 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。
④ ジョブを投入