

附錄. 在 Linux 或 Unix 上使用 Gaussian 09 計算

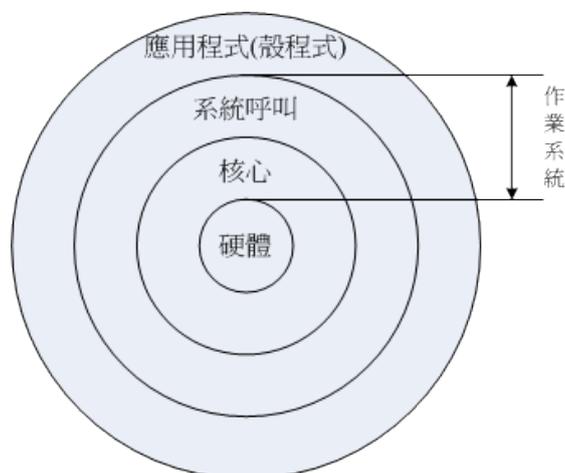
I. 計算機概論與 Linux (Unix) 作業系統簡介

基本電腦架構

電腦的主要架構依外觀來看可以簡單的分為三個單元，輸入單元如滑鼠、鍵盤，輸出單元如銀幕、印表機，主機是處理所有資料的核心。主機內主要的架構如下：

1. 中央處理器 (CPU)：處理所有資料的核心。
2. 主機板 (Motherboard)：完成各個部分資料流通的主要角色。
3. 記憶體 (RAM)：是儲存 CPU 欲處理或處理完的資料中繼站。
4. 硬碟 (Hard disk)：永久儲存資料的地方。
5. 介面卡：顯示卡 (Graphic card)，運算加速卡等。
6. 網路連線設備。

其中最重要的是中央處理器、主機板、記憶體與硬碟，中央處理器、主機板、記憶體主要影響電腦的運算效能，硬碟主要影響永久資料讀取與儲存的效能。下面我們簡單的介紹一下軟體運作的部分：

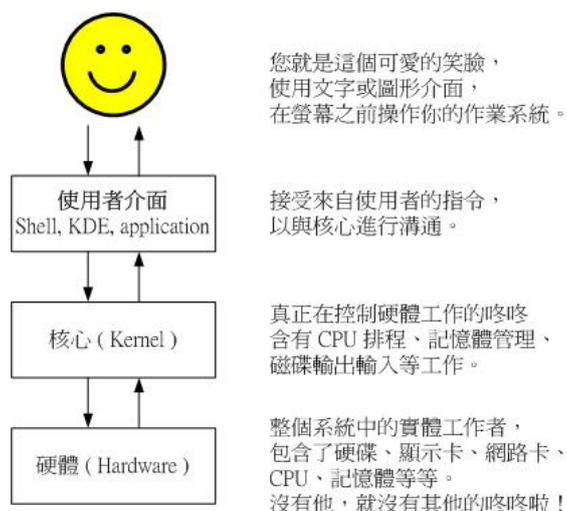


¹電腦硬體與作業系統關係圖

由上圖可以看到最中間是電腦硬體也就是主機的部分，而核心開始到系統呼叫都是作業系統程式的部分，其中核心是作業系統程式用來控制 CPU、記憶體管理等部分，系統呼叫主要是提供一個簡便的管道讓使用者與核心溝通來控制硬體，在 linux 或 unix 系統常聽到 kernel 指的就是這裡的核心，而 shell (如 bash、

¹ 引用自鳥哥的 Linux 私房菜網站

csh、tcsh...等) 指的就是系統呼叫的部分，而使用者自己安裝的工具程式就是應用程式的部分



²Shell、kernel 與硬體的關係

Shell 是決定程式作業環境的關鍵，比如說大部分的程式都是用 C 程式語言寫出來的，如果想執行這類程式，必須使用 csh 或 tcsh shell，來提供支援 C 程式語言運行的環境。

Linux 作業系統下建立 Gaussian 09 工作站硬體與軟體的環境設定

影響 Gaussian 09 運算效能主要是 CPU、記憶體的運算、處理效能，硬碟只有當計算產生大量的暫存檔案時會影響較大，所以能夠使用讀寫速度較快的硬碟當然效能會較高，而系統分割建議配置如下：

1. / (這是作業系統的主要所在)
2. /home (放置所有使用者資料的地方)
3. /swap (相當於 windows 的虛擬記憶體)
4. /s (放置 Gaussian 09 運算時產生的暫存檔案所在)

注意：對於配置 /s 分割區時建議採用多顆硬碟組成硬碟陣列 (Raid 0)或固態硬碟來增加硬碟的讀寫速度，而放置主系統檔案與使用者檔案的分割區，因為資料保存安全的問題，不建議只用 Raid 0，因為若發生壞軌無法復原資料。

詳細的資料可以參閱下列網站：

http://linux.vbird.org/linux_basic/0420quota.php

<http://itgroup.blueshop.com.tw/towns/hc?n=convew&i=384421>

[https://www.suse.com/zh-tw/documentation/sles10/book_sle_reference/data/sec.yast2.](https://www.suse.com/zh-tw/documentation/sles10/book_sle_reference/data/sec.yast2)

² 引用自鳥哥的 Linux 私房菜網站

軟體的部分，作業系統建議使用 Linux 或 Unix 系統，主要是基於安全性高以及硬體資源使用限制較少等原因，目前免費的作業系統有 openSUSE、Fedora、Ubuntu、CentOS 等，對於初次接觸 Linux 系統的使用者來說，可以使用 SUSE 系列的作業系統，具有圖形化的簡單安裝介面以及具備所有伺服器或工作站需要的軟體工具，有免費版的 openSUSE 以及企業版的 SUSE，企業版的 SUSE 可以免費下載但是不能更新。很多量子化學計算軟體需要 C shell 的環境，所以建議 shell 採用 csh 或 tcsh，可以減少很多環境設定的問題。

Linux 指令簡介

除了個人電腦安裝 linux 作業系統可以使用圖形端操作，大部分遠端工作站還是需要使用指令來操作 linux，以下介紹比較常用的幾個基本指令，其餘的可以參考下列網址：

http://linux.vbird.org/linux_basic/

ls	顯示所有非隱藏的資料夾與檔案
cd directryname	進入名稱為 directryname 的資料夾
cd ..	回到上一層資料夾
rm -ir name	刪除名稱為 name 的檔案或資料夾
pwd	顯示當前的資料夾路徑
mkdir name	建立名稱 name 的空白資料夾

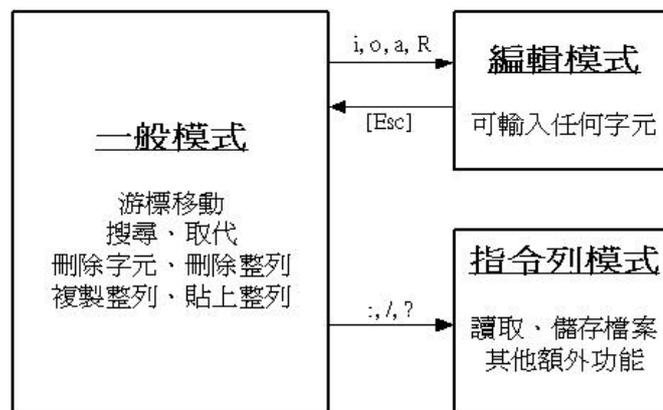
vi (vim) 簡介與指令簡介

在早期比較舊的 linux 或 unix 系統有舊版本的 vi 指令，但是現在的 linux 或 unix 系統幾乎都是較新的 vim 指令取代 vi 指令，舊版本的 vi 指令以及更詳細的說明可以參考下列網址：

http://linux.vbird.org/linux_basic/0310vi.php#vi

下面將簡單介紹現在比較新的 linux 或 unix 作業系統的常用指令，vi 指令也可以在 vim 上使用，除了 vi 舊有的指令，vim 加入了編輯文書常用的按鍵（方向鍵、delete 鍵與倒退鍵 ←），以下是簡介，**對於 vi 指令最快熟悉的方式就是實際試試看。**

三種主要模式，三種模式的關係如下圖



a、一般模式：直接在遠端主機螢幕上輸入 vi 或者 vi 檔案名即可開啟，螢幕左下角不會顯示任何說明，右下角則會顯示行數與每列的列數，直接輸入行數可以跳列。在此模式下可以使用下列方式進行簡單的編輯（執行 vi 指令都是按 Enter 鍵）

/ 檔案中特定字串	搜尋檔案中特定字串
n	重複前一個搜尋的動作，如執行完 / 特定字串，持續輸入 n 往下搜尋
N	與 n 類似，只是往上搜尋
x	與 delete 鍵功能相同
X	與倒退鍵 ← 功能相同
dd	刪除一整列
ndd	n 為數字。刪除游標所在的向下 n 列，例如 20dd 則是刪除 20 列
Y 或 y	複製游標所在的那一列
p 或 P	p 是將已複製的資料在游標下一列貼上，P 則為貼在游標上一列。舉例來說，我目前游標在第 20 列，且已經複製了 10 列資料。則按下 p 後，那 10 列資料會貼在原本的 20 列之後，亦即由 21 列開始貼。但如果是按下 P 呢？那麼原本的第 20 列會被推到變成 30 列。

n1, n2, d	n1、n2 是數字，d 是刪除的意思，此指令代表將 n1 行到 n2 行通通刪除，檔案內最後一列用 \$ 符號代表。舉例來說，如果輸入 1 \$ d 則刪除第一列到最後一列所有的內容。
G	移動到這個檔案的最後一列
gg	直接跳到第一列
[Ctrl] + [f] (Page Down)	螢幕一次往下移動一頁
[Ctrl] + [b] (Page Up)	螢幕一次往上移動一頁

- b、編輯模式：進入一般模式後，輸入 **i, o, a** 任一個字母即會進入一般編輯模式，按 **R** 即進入取代模式，按 **ESC** 則為退出編輯模式返回至一般模式，在這二種模式可以直接輸入或編輯內容，如方向鍵、delete 與倒退鍵都可以使用，可以在別的地方複製內容按滑鼠滾輪或右鍵貼上。
- c、指令列模式：進入一般模式後，亦可透過 **:**(冒號) 進入指令列模式，下面列出代表各種不同指令列模式的指令：

:w	將編輯的資料寫入硬碟檔案中
:w!	若檔案屬性為『唯讀』時，強制寫入該檔案。
:q 或 :q!	離開 vi，加驚嘆號表示強制離開
:wq	儲存並離開 vi
:w filename	儲存到檔名為 filename 的檔案中，副檔名也寫上去
:r filename	讀取檔名為 filename 的檔案內容，副檔名也寫上去
:n1,n2 w filename	把第 n1 到 n2 列的內容存到檔名為 filename 的檔案中

II. 使用 Gaussian 09 計算

Gaussian 09 有不同作業系統下的版本，主要是 windows、Linux 與 Mac 版本，建構工作站我們建議使用 Linux 版本，其作業系統有許多完整的程式工具資源可以免費取得，而且計算軟體效能比較不受作業系統限制。購買的 Gaussian 09 一般分為二種類型，一種是直接安裝好即可執行的 binary 版本，一種是需要進行編譯的原始碼，以下我們介紹一些計算 job 的範例、個人用戶設定以及國網中心使用方式。

Gaussian 09 個人用戶安裝

Binary 版本

1. 先安裝且設定好 Unix 或者 Linux 系統，需要 C-shell 的環境。
2. shell 設定在 C-shell，如 tcsh、csh。
3. 之後放入 Gaussian 光碟，把 WKSSRC.TGZ 檔案複製到欲安裝的目錄下，並且解壓縮。

Ex: 如欲安裝在 /home/tayler 目錄下，把 WKSSRC.TGZ 複製到 /home/tayler 目錄下，執行 tar -zxvf WKSSRC.TGZ，即會產生 g09 目錄。

4. 使用 vi 編輯器設定環境變數的指令如下 (vi .login 或者 vi .cshrc，輸入如下設定，以安裝到 /home/tayler 為例)：

```
setenv g09root /home/tayler
setenv PATH "${PATH}:%g09root/g09"
setenv PATH "${PATH}:%g09root/g09/bsd"
setenv GAUSS_EXEDIR %g09root/g09
setenv GAUSS_SCRDIR /s/home
setenv LD_LIBRARY_PATH %g09root/g09:%g09root/g09/bsd
```

註：其他相關的設定可以參閱下列網址

http://www.gaussian.com/g_tech/g_ur/m_running.htm

退出 vi 並儲存 (按 ESC 鍵 → 輸入 :wq → Enter 鍵)，然後執行下列指令

```
source /home/tayler/.login
```

(如果設定在 .cshrc 檔裡則執行 source /home/tayler/.cshrc 指令)

待 Gaussian 09 安裝完畢、環境變數設定完畢後，即可使用下面指令來進行 Gaussian 09 的計算工作

第一種方式：(以 Gaussian 的測試檔 Test0002.com 為例子)

```
g09 Test0002.com &
```

這樣產生的結果檔案會用預設的副檔名.log，即 Test0002.log，&代表放入背景執行。

第二種方式：(以 Gaussian 的測試檔 Test0002.com 為例子)

```
g09 <Test0002.com> Test0002.log &
```

使用此方式輸入檔與輸出檔副檔名可以自己命名，也就是副檔名不一定要是 .com 與 .log。

例如：

```
g09 <Test0002.inp> Test0002.out &
```

於國網中心之計算伺服器使用 Gaussian 09

1. 先向國網中心申請帳號，登入後到下面目錄
/pkg/chem/gaussian/
2. 用 linux 指令 less 瀏覽 G09.README 檔案，裡面會說明使用 Gaussian 09 的相關設定 (以使用者 u50cct00 為例)
主要內容如下：
 - a、 在自己的 home 目錄下，vi .bashrc 並且加入下列設定
source /pkg/chem/gaussian/setg09
 - b、 儲存後退出，執行下列指令
source /home/ u50cct00/.bashrc
 - c、 輸入 g09sub Test0002 即可執行計算
詳細說明可參閱下列國網中心說明
https://service.nchc.org.tw/mrc/faq/faq_answer.php?faqidnum=255
3. 照著設定檔說明設定好可以用 g09sub Test0002 進行計算 (以計算工作 Test0002.com 為例，在這裡建議副檔名一慮採用.com)，可以使用相關指令如 bjobs 查閱計算狀況。可以參閱下列網站說明
<http://humem.nchc.org.tw/NGS/webpages/tutorial.php>

原始碼產生執行檔

1. 先安裝且設定好 Unix 或者 Linux 系統。
2. shell 設定為 C-shell，如 tcsh、csh。
3. 安裝 pgi Fortran 77 編譯器 (Gaussian 公司所使用的編譯器)
4. 之後放入 Gaussian 光碟，把 WKSSRC.TGZ 檔案複製到欲安裝的目錄下，並且解壓縮。
Ex: 如欲安裝在 /home/tayler 目錄下，把 WKSSRC.TGZ 複製到 /home/tayler 目錄下，執行 tar -zxvf WKSSRC.TGZ，會看到 g09 目錄。
5. 使用 vi 編輯器設定環境變數，指令如下
vi .login 或者 vi .cshrc，輸入下列設定，以安裝到 /home/tayler 為例

```
setenv g09root /home/tayler
setenv PATH "${PATH}:%g09root/g09"
setenv PATH "${PATH}:%g09root/g09/bsd"
setenv GAUSS_EXEDIR %g09root/g09
setenv GAUSS_SCRDIR /s/home
setenv LD_LIBRARY_PATH %g09root/g09:%g09root/g09/bsd
```

註 1：其他相關的設定可以參閱下列網址

http://gaussian.com/g16/g16bin_install.pdf

退出 vi 並儲存 (按 ESC 鍵 → 按 shift 鍵 + 冒號鍵 → 輸入 wq → Enter 鍵)，然後執行下列指令

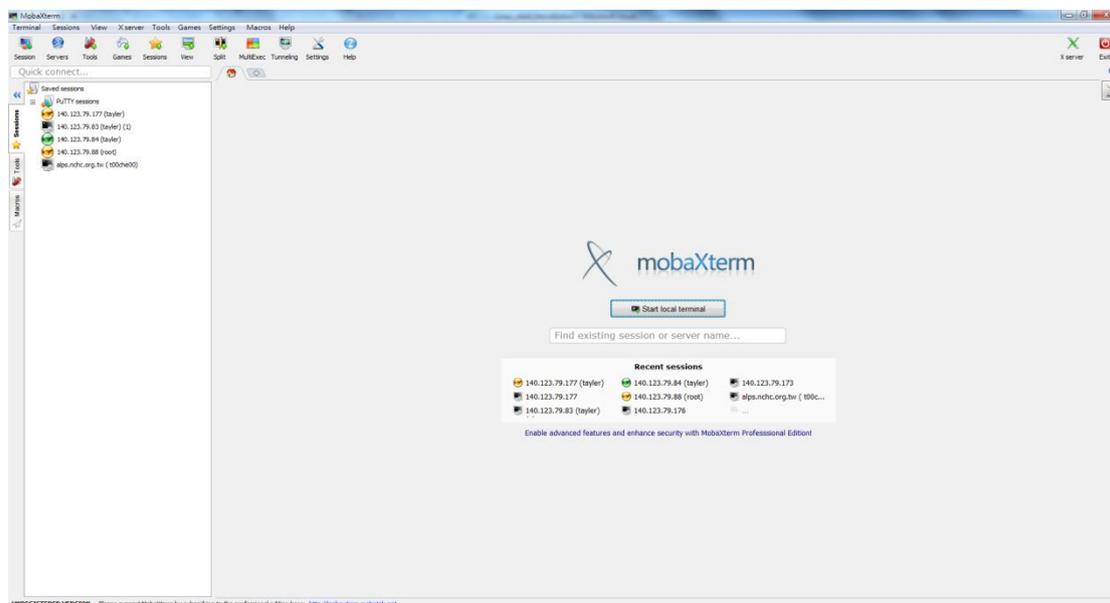
```
source /home/taylor/.login (如果設定在.cshrc 檔裡則執行 source /home/taylor/.cshrc 指令)
```

6. 直接執行 `bsd/bldg09 > & make.log &` 進行編譯。需等待幾個小時 (視編譯電腦的硬體條件而定)，可用 `tail -f make.log` 隨時監控編譯過程
7. 正常編譯結束後，進入 `g09` 目錄，即可看到 `.exe` 檔案，此即 Gaussian 09 可看到可執行檔。
8. 接下來進行 Test 檔案的測試，Gaussian D01 總共有 1044 個測試檔，可以不必全部測試，Gaussian 公司建議至少測試編號 0001, 0028, 0094, 0155, 0194, 0296, and 0302 的 test file，Gaussian 公司提供的結果檔案在 `$g09root/g09/tests/amd64` 目錄下，可以個別用 `diff` 的指令做檢查。
`diff -y Test0001.log Test0001-Gaussian.log > diff-test0001`

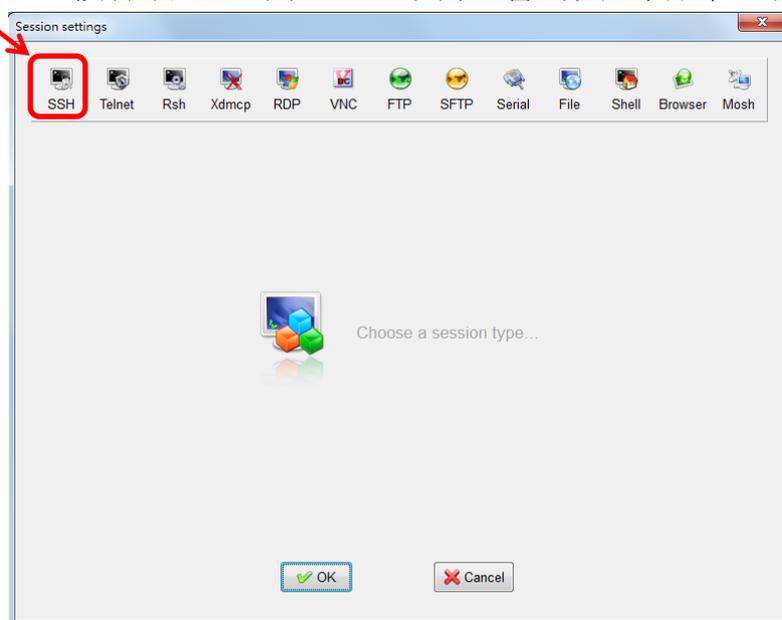
註：Test0001-Gaussian.log 是 Gaussian 提供的結果檔案，之後用 vi 編輯器瀏覽 diff-test0001 檔案檢查即可。

III. 在 Linux 或 Unix 上進行 Gaussian 09 計算範例

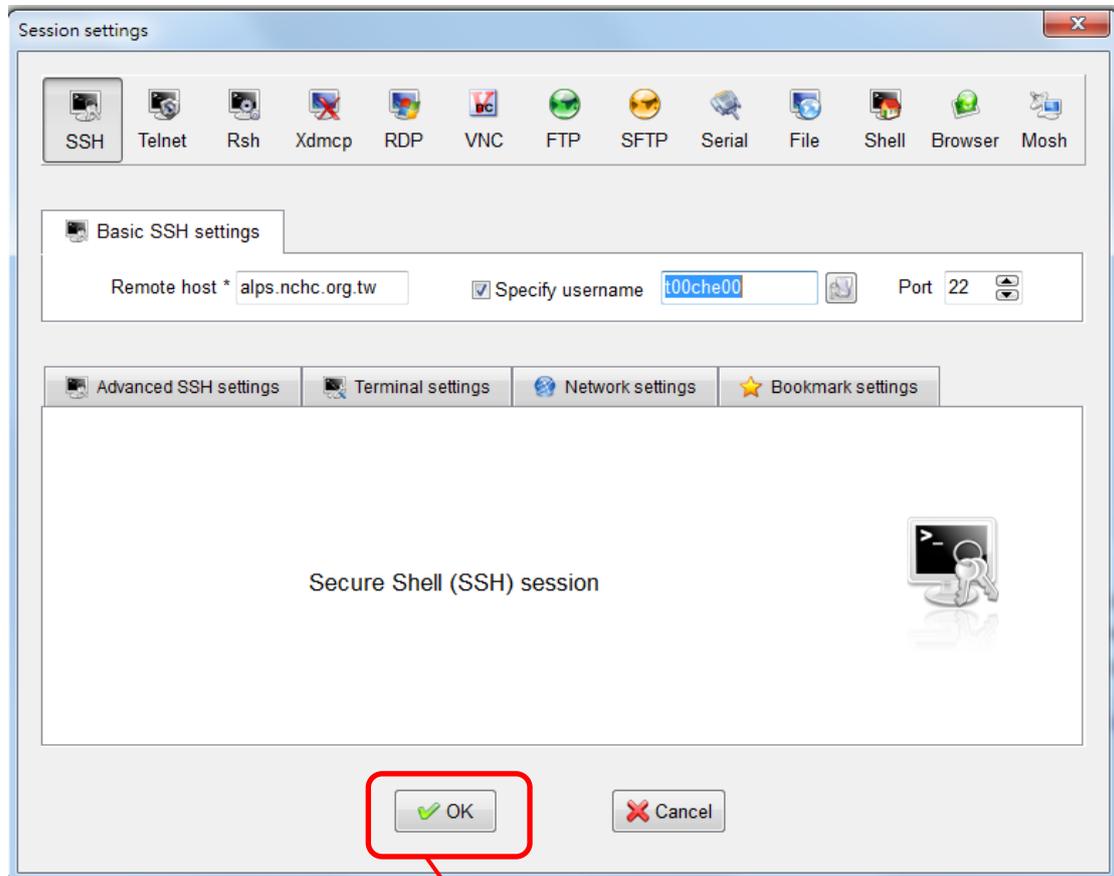
1. 各位在自己電腦上可以下載 mobaXterm 軟體 (<http://mobaXterm.mobatek.net/>)，安裝完後直接點擊兩下執行即可，國網中心已經為各位安裝好了，請各位直接開啟，可以看到下列畫面。



2. 接著點選左上角 Session 圖示，會出現如下銀幕，點擊紅色框框的 SSH 圖示



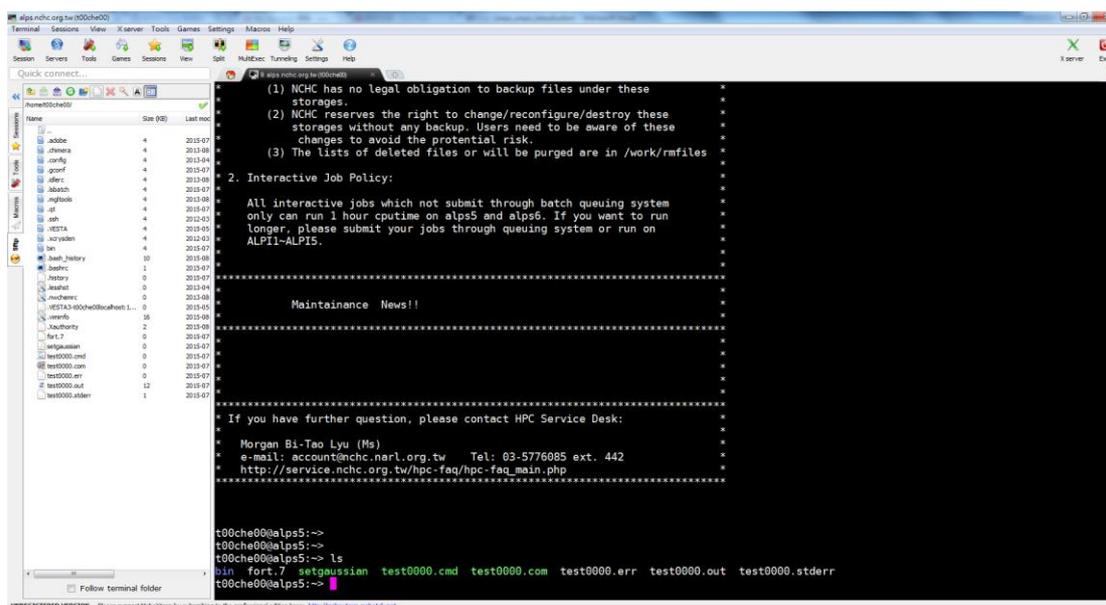
3. 點擊之後會出現如下畫面，**Remote host 欄位輸入 alps.nchc.org.tw**，Specific name 欄打勾並輸入 t00chexx (xx : 01~40，看您的號碼是幾號)，按 OK 登入並輸入密碼 NCHCGaussian2015 登入遠端主機，我們以教學帳號為例



按 OK 登入遠端工作站

4. 登入後將看到如下畫面，可以輸入 `ls` 看到資料夾裡面的檔案，可以看到目前有七個檔案一個資料夾，請各位依序輸入下列指令後按 `Enter` 送出

- a、 `pwd` (螢幕會顯示 `/home/t00chexx`，這是一開始登入預設的個人資料夾)
- b、 **`source /home/t00che00/setgaussian` (注意：只有第一次登入才需要執行此步驟，以後要回到 `/work/t00chexx` 請使用 `cd` 指令，否則已建立的檔案會被刪除)**
- c、 `pwd` (螢幕會顯示 `/work/t00chexx`，這是個人的工作資料夾，所有的計算都在此目錄下進行)



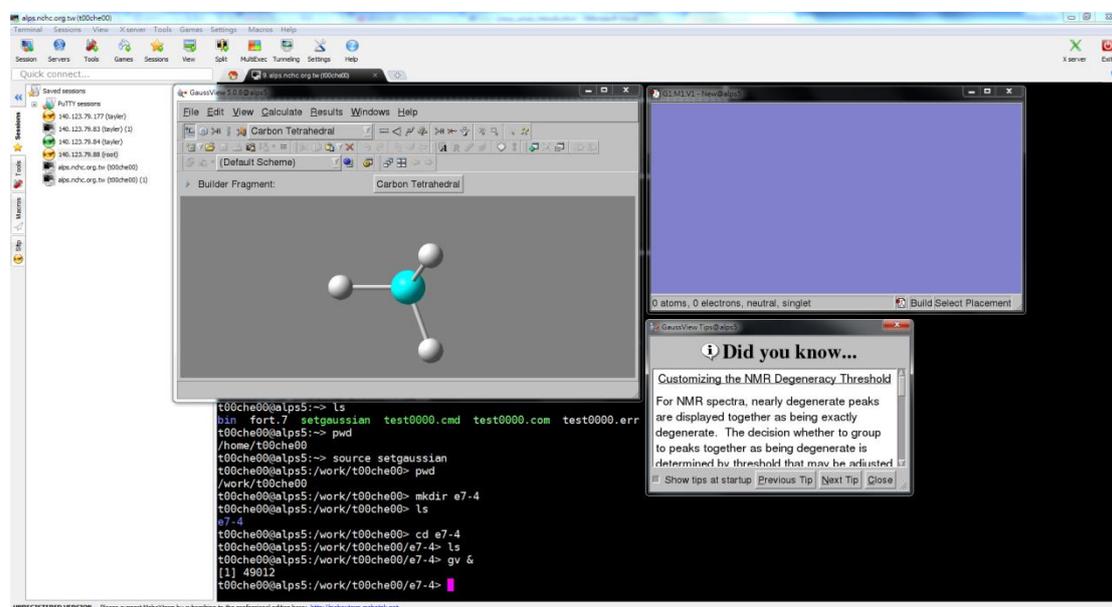
5. 首先建立一個資料夾 `e7-4` (以練習題 7-4 為例)，請依序輸入下列指令

- a、 `mkdir e7-4` (建立資料夾 `e7-4`，`rm -ir` 用來刪除檔案或資料夾)
- b、 `ls`
- c、 `cd e7-4` (切換到資料夾 `e7-4` 內，`cd ..` 是用來切換到上一層資料夾，例如目前所在資料夾 `/work/t00chexx/e7-4`，執行 `cd ..` 之後回到 `/work/t00chexx` 資料夾)，可以看到結果如下



6. 編輯 input file，可以有二種方式，說明如下。

- a、練習題 7-4 需要建立 OH、NH₃、H₂O 以及 NH₂ 結構，請執行 `gv & (& : shift +7)`，很重要請記得，這代表在背景下執行 **GaussView**
- b、程式) 會看到 gauss view 畫面如下(如欲關閉任何視窗可直接按視窗右上角 X 按鍵)，接下來可以開始建立這些分子的結構並存檔，之後在命令列視窗中輸入 `ls` 可以看到四個 input file (H2O.com、NH2.com、NH3.com 以及 OH.com)。
- c、另外一種方式是假如沒有購買 linux 版本的 Gaussview，請使用 Windows 端的 Gaussview (或任何可以建立結構的軟體)，建好結構存檔，然後使用 window 內建的 wordpad 開啟，先在 linux 端以 `vi H2O.com` 編輯輸入 `%chk(暫存檔)`，`%mem(設定記憶體)`，`%nproc(設定核心數)`、計算方法、`command` 等資訊 (練習帳號只能用一核心計算)，再把結構複製貼過來 linux 端，然後儲存離開 `vi`。



7. 以 `vi` 編輯 input file (以編輯 H2O.com 為例)，`vi H2O.com` → 按 `i` 進入編輯模式，把內容修改成如下畫面，方法是 M062X，基底是 6-31+G(d,p)，做結構最佳化計算並計算振動頻率，這時 `vi` 指令就派上用場啦。

Gaussian 暫存 chk 檔指定名稱

計算方法與選擇計算工作類型(如單點、結構最佳化...等)

計算工作內容說明

分子總電荷、多重度與結構

記得進入編輯模式

```

%chk=H2O.chk
# M062X/6-31+G(d,p) OPT FREQ
The optimization calculation of water molecu
0 1
O      0.00000000    0.00000000   -0.11081188
H      0.00000000   -0.78397589    0.44324751
H     -0.00000000    0.78397589    0.44324751
-- INSERT --
11,1 All

```

8. 編輯完之後按 ESC，然後鍵入 shift + : (冒號)，然後輸入 wq 儲存離開。

空幾列

儲存後離開 vi 編輯

```

%chk=H2O.chk
# M062X/6-31+G(d,p) OPT FREQ
The optimization calculation of water molecu
0 1
O      0.00000000    0.00000000   -0.11081188
H      0.00000000   -0.78397589    0.44324751
H     -0.00000000    0.78397589    0.44324751
:wq

```

9. 同樣方法編輯其他檔案，結構後面只留下空幾列，其餘的都刪除。修改完之後以 g09sub H2O(.com 不要打上去)，以 bjobs 查看計算狀態，PEND 表示排隊中，RUN 表示已經在計算，當計算結束之後輸入 ls 即可看到附檔名為.log 的結果檔案以及設定的 H2O.chk 檔。

```
t00che00@alps5:/work/t00che00/e7-4> vi H2O.com
t00che00@alps5:/work/t00che00/e7-4> g09sub H2O
Job <4663800> is submitted to queue <test>.
t00che00@alps5:/work/t00che00/e7-4> bjobs
JOBID  USER  STAT  QUEUE  FROM_HOST  EXEC_HOST  JOB_NAME  SUBMIT_TIME
4663800 t00che0 PEND  test  alps5      alps5      H2O       Aug 5 12:27
t00che00@alps5:/work/t00che00/e7-4> bjobs
JOBID  USER  STAT  QUEUE  FROM_HOST  EXEC_HOST  JOB_NAME  SUBMIT_TIME
4663800 t00che0 RUN   test  alps5      group5     H2O       Aug 5 12:27
t00che00@alps5:/work/t00che00/e7-4> bjobs
JOBID  USER  STAT  QUEUE  FROM_HOST  EXEC_HOST  JOB_NAME  SUBMIT_TIME
4663800 t00che0 RUN   test  alps5      group5     H2O       Aug 5 12:27
t00che00@alps5:/work/t00che00/e7-4>
```

10. 切到 gauss view 視窗，選 file → Open files → File type 改成 Gaussian output files (*.log) 開啟 H2O.log 察看結果。也可以以 vi H2O.log → 使用 vi 搜尋的指令(/搜尋的字串+n or N)來找到需要的數據

```
t00che00@alps5:/work/t00che00/e7-4> ls
H2O.chk H2O.cmd H2O.com H2O.err H2O.out H2O.stderr NH2.com NH3.com OH.com
t00che00@alps5:/work/t00che00/e7-4>
```

11. 我們也可以回到 mobaxterm 的 Session 選項 → 點擊 SFTP 圖示 → 一樣輸入 Remote host、username 以及密碼，把結果檔案下載到桌機桌面

