

附錄. 在 Unix 系統上使用 Gaussian 09 與 Gaussian 16 程式

I. Linux 作業系統下建立 Gaussian 09 (Gaussian 16) 工作站硬體與軟體的環境設定

計算工作站往往需要花費不少經費購置，當然會希望能夠把計算效能發揮到最好，我們來了解一下為什麼要選擇 Unix (Linux) 作業系統而不選擇大家平常較熟悉的 windows 作業系統，主要原因有下列幾點，依重要性由前至後排列：

1. 計算軟體講求效率往往是編譯式語言 C、C++ 或 Fortran 寫成，要有高效能的計算軟體，必須先要有良好編譯器從原始碼產生執行檔，windows 系統上良好的編譯器選擇很少，幾乎只有微軟公司所出的 Visual studio，Fortran 甚至沒有良好的編譯器，導致 windows 作業系統相容性較差，而 Unix (Linux) 有很豐富 C、C++ 與 Fortran 編譯器，甚至有 Intel、PGI 公司開發的編譯器都能對此種編譯語言所寫的程式做很大程度的最佳化，提高程式的效能，重要的是這些編譯器目前還是持續開發與改進。
2. 豐富的程式撰寫與資料分析工具套件，Unix 系統歷史上因為大部分都是程式開發工程師或者專業計算用途使用為主，累積了豐富與完整的程式開發、計算軟體需要的相關套件與建構伺服器需要的套件，而且大部分都已經整合在一起，建構專業計算環境具有非常好的便利性。
3. 資料安全性問題也很重要，Windows 系統有著許多的安全性威脅，如電腦病毒、蠕蟲，甚至勒索病毒，目前的網路攻擊幾乎都以 Windows 系統為主要目標，Windows 系統為了使用者方便，使用者權限的限制較放鬆，而 Unix，使用者權限限制很明確且嚴格，這樣可以減少很多不良習慣使用者造成的潛在危害，還有系統中重要的資料不是程式而是資料格式，這讓目前主流病毒沒有太多發揮空間，另外因為大部分程式碼是開源的所以程式碼幾乎是被公開檢驗的，主要的商業版本也都有開放免費版本，從使用免費版本回報的使用者統計資料中挑選最安全的套件組成商業版，這些都會讓系統的漏洞會減少很多。
4. 硬體的限制性，Unix 對於實體硬體取用並無限制，如記憶體用量無限制，安裝多少實體記憶體就使用多少實體記憶體，這雖然對於桌上型電腦（目前記憶體最大就 128GB）並無太大影響，但對於超大型主機如 Taiwania 總記憶體達 6TB，遠超過 Windows 系統專業版最大可以取用的上限。

目前免費的作業系統有 openSUSE、Fedora、Ubuntu、CentOS 等，企業版的有 Red Hat、SUSE 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，商業版可以免費下載使用，但是不能更新，SUSE 系列作業系統有 Nvidia 公司的支持，在顯示卡的驅動上支援較好，具有圖形化的簡單安裝介面以及整合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 硬體建議配備

計算工作站不一定要購買價格幾十萬很昂貴的機架式伺服器，現在的桌上型電腦也是一個可以考慮的選項，以預算 5 萬元來說，可以配置如下的電腦規格就可以得到非常不錯的計算效能，也可以考慮加上固態硬碟來提升效能。

品名	產品名稱
處理器 CPU	Intel i7-8700K【6核/12緒】3.7GHz(↑4.7GHz)/12M/UHD630/95W
主機板 MB	華碩 TUF Z370-PRO GAMING【獨家軍規-五年】 (ATX/1D1H/SLI/ I 網、內顯)
記憶體 RAM	美光 Micron Crucial 16G*4 DDR4-2666
傳統內接硬碟 HDD	硬碟一(主系統、使用者資料目錄): WD 2TB 64M/7200 轉 暫存檔磁碟區(Raid 0): 2 顆 WD 2TB 64M/7200 轉
封閉式 開放式水冷	海盜船 H80i v2 12cm 冷排/CorsairLink/(圓)銅冷頭/雙扇/ 厚:7.7(CW-9060024-WW)【VWX】
CASE 機殼	聯力 PC-8N(黑) 顯卡長 29/CPU 高 17/SSD*1/ATX
電源供應器	振華 冰山銀蝶 II 600W/銀牌/白殼/5 年免費/DC-DC/CPU 主線:18AWG:裸銅

Linux 作業軟體安裝系統建議分割方式

影響 Gaussian 09 (Gaussain 16) 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 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，建議暫存磁碟區要大於 1TB，高階理論方法計算產生暫存檔大小有時候是很可觀的可以到達幾百 GB，因為資料保存安全的問題，而放置主系統檔案與使用者檔案的分割區不建議只用 Raid 0，因為若發生壞軌無法復原資料，可以用 Raid 10 兼顧備份與讀寫效能。通常建議另外建構 NFS 伺服器直接儲存重要的計算資料，而把暫存檔直接寫於計算主機硬碟中。

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.system.raid.html

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，其中以 **vi (vim)**指令最為重要，是處理文字檔案編輯的重要工具，linux 操作不在這詳述，請參閱下列資料：

基本指令：http://linux.vbird.org/linux_basic/

vi (vim)指令：http://linux.vbird.org/linux_basic/0310vi.php#vi

II. 使用 Gaussian 09 (Gaussain 16) 計算

購買的 Gaussian 09 (Gaussian 16) 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 (Gaussian 16) 個人用戶安裝

(1) Binary 版本 (從原廠購置之執行檔)

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。
- 使用 vi 編輯器設定環境變數 (vi .login、vi .cshrc 或 vi .tcshrc，輸入如下表設定，以安裝到 /home/tayler 為例，Gaussian 16 只要把 g09root 換成 g16root，g09 換成 g16)：

setenv g09root /home/tayler	<i>Gaussian 09 程式檔案放置主目錄，/home/tayler 是範例主目錄</i>
setenv PATH "\${PATH}:%g09root/g09"	<i>加入 Gaussian 09 程式所在子目錄到作業系統蒐尋清單中</i>
setenv PATH \${PATH}:%g09root/g09/bsd"	<i>Gaussian 09 程式設檔目錄到作業系統蒐尋清單中</i>
setenv GAUSS_EXEDIR %g09root/g09	<i>Gaussian 09 程式執行檔目錄</i>
setenv GAUSS_SCRDIR /s/tayler	<i>計算過程暫存檔目錄，依個人電腦設定，/s/tayler 是範例暫存檔目錄</i>
setenv LD_LIBRARY_PATH %g09root/g09:%g09root/g09/bsd 設定 <i>Gaussian 09 程式需要的函式庫目錄</i>	

註：其他相關的設定可以參閱下列網址

<https://gaussian.com/running/?tabid=6>

- 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 (前面提過看個人設定可能是 .login、.cshrc 或 .tcshrc)
(如果設定在 .cshrc 檔裡則執行 source /home/tayler/.cshrc 指令)

(2) Source Code 版本 (從原廠購置之原始碼)

- 先安裝且設定好 Unix 或者 Linux 系統。
- shell 設定為 C-shell，如 tcsh、csh。
- 安裝 pgi 17.7 版本編譯器 (Gaussian 公司所建議使用的編譯器)，或者更高版本。
- 如果需要使用 GPU，需先安裝 GPU 圖形加速卡、加速卡驅動程式、cuda 程式語言套件 (可參閱 <https://docs.nvidia.com/cuda/cuda-installation-guide-linux/index.html>)，目前只支援 K40, K80 與 P100 三種 GPU 加速卡。
- 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。

6. 使用 vi 編輯器設定環境變數，指令如下

vi .login、**vi .cshrc** 或者 **vi .tcshrc**，輸入與前面介紹 **binary** 版本相同的環境變數設定，以安裝到/home/tayler 為例

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/tayler/.login` (如果設定在.cshrc 檔裡面，則執行 `source /home/tayler/.cshrc` 指令)

直接執行 `bsd/bldg09 > & make.log &` 進行編譯 (如果是 Gaussain 16 則是 `bsd/bldg16 > & make.log &`，Gaussian 16 產生 GPU 支援版本需使用 `bsd/bldg16 all gpu`)。需等待 40 分鐘至幾個小時 (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

註 1：更詳細的說明可以參閱下列網址

https://gaussian.com/g16/g16src_install.pdf

7. 正常編譯結束後，進入 g09 目錄 (或 g16 目錄)，即可看到 .exe 檔案，此即 Gaussian 09 (Gaussian 16)可執行檔。
8. 接下來進行 Test 檔案的測試，Gaussian 09 總共有 1044 個測試檔 (Gaussian 16 總共有 1205 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 (\$g16root/g16/tests/amd64)目錄下，可以個別用 diff 的指令做檢查。如：

diff -y Test0001.log Test0001-Gaussian.log > diff-test0001

如果要測試全部的測試檔，建議使用 Gaussian 公司提供的方式(參閱 <http://gaussian.com/testjobs/> 網站)，會是較便利的方式。

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。

Gaussian 09 計算使用指令

待 Gaussian 09 (Gaussian 16)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 (Gaussian 16)的計算工作

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

```
g09 Test0002.com & or g16 Test0002.com &
```

這樣產生的結果檔案會用預設的附檔名.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 & or g16 <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 &
```

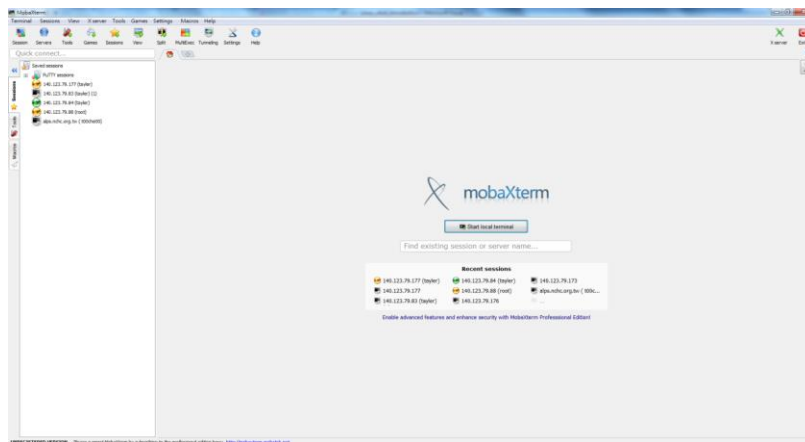
```
g16 <Test0002.inp> Test0002.out &
```

Gaussian 網站關於計算方式的說明：

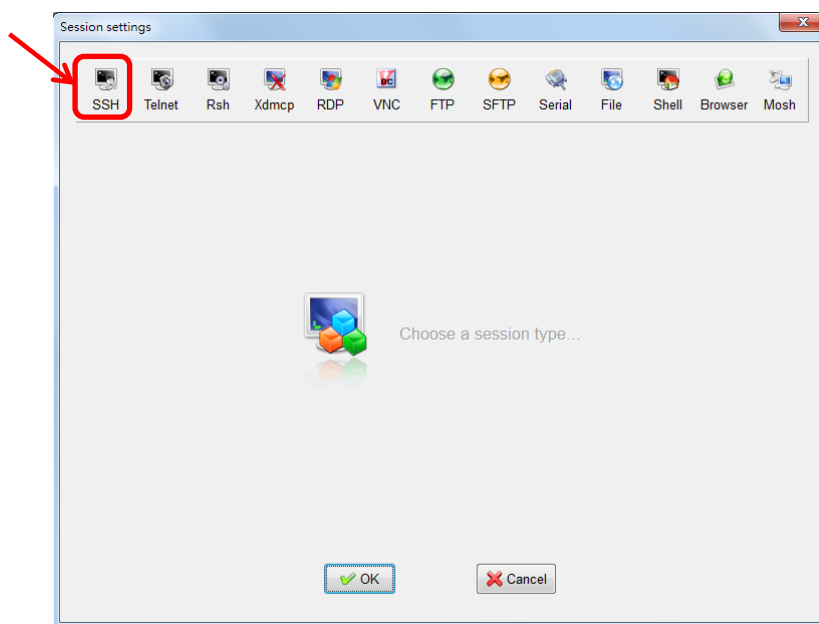
<https://gaussian.com/running/?tabid=6>

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

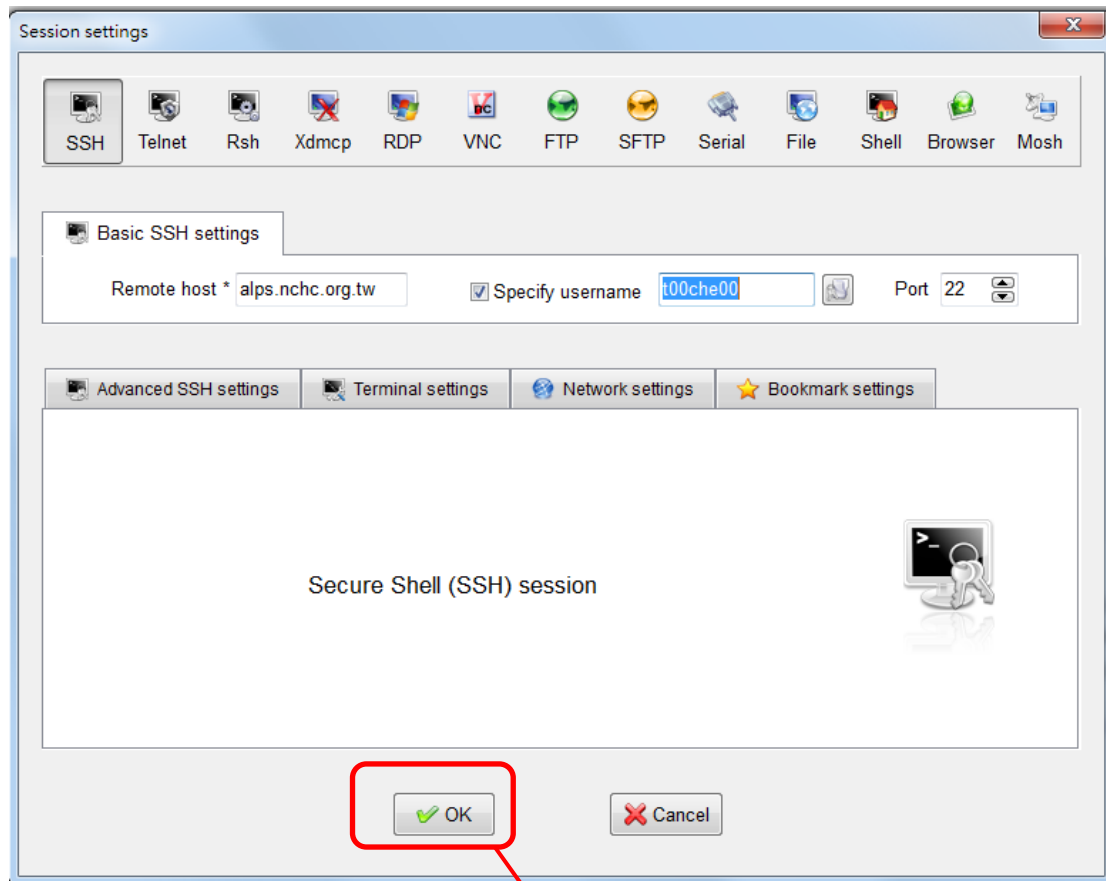
1. 大部分計算的主機都是獨立在具備空調系統的房間內，取得良好的散熱以取得良好的計算效能，因此都是由個人桌機藉由遠端連線如 ssh 遠端加密連線到計算主機上，進行計算工作，然後把結果資料藉由遠端傳輸途徑如 sftp 遠端加密的 FTP 傳輸到個人電腦作後續處理，底下我們將提供一種此種模式的範例，各位在自己電腦上可以下載 mobaxterm 軟體(<http://mobaxterm.mobatek.net/>)，或者也個人習慣的 ssh、telnet 連線軟體也可以，安裝完後直接點擊兩下執行即可，可以看到下列畫面。



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，輸入遠端主機位址如 IP 連線到遠端主機



3. 以使用 mobaxterm 軟體為例，點擊之後會出現如下畫面，**Remote host 欄位**輸入遠端主機位址如 IP 連線到遠端主機，此遠端位址可以是國網中心申請的計算主機或時彥是自行架設計算主機的 IP，**Specific name** 欄打勾並輸入帳號，按下 **OK** 鈕後會要求輸入密碼，即可連線遠端電腦。

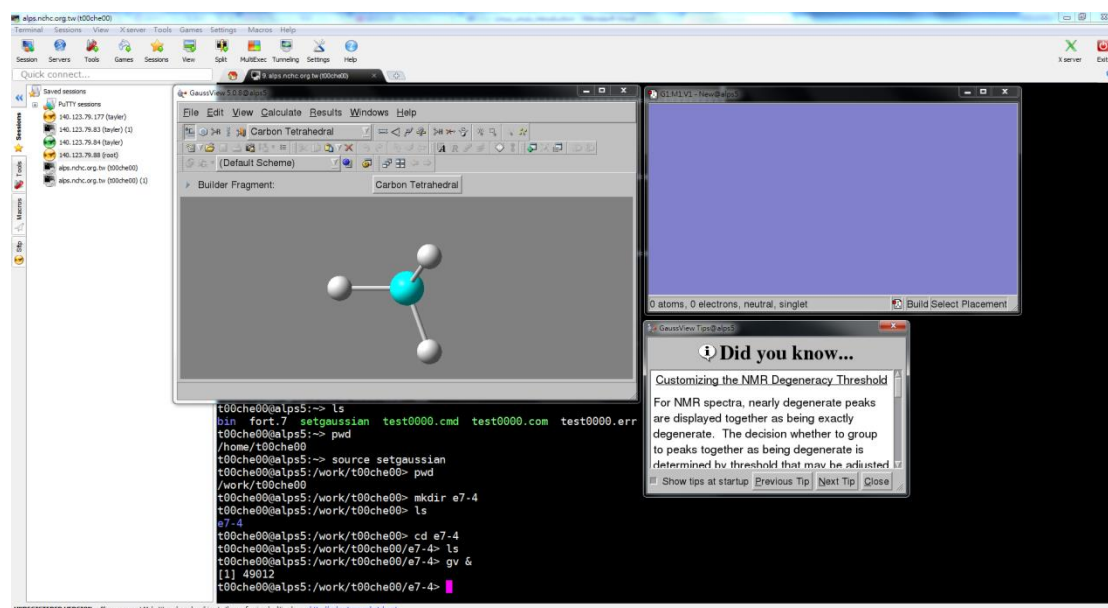


按 OK 登入遠端工作站

在個人 Linux 工作站上建立計算工作

1. 進入後通常會顯示帳號 home 目錄，如範例是/home/taylor1596，這是一開始登入預設的個人資料夾。
2. 使用 vi 編輯 input file，可以有二種方式，以建立 H₂O 的輸入檔為例，說明如下：
- 3.

a、第一種方式，如果有購買 Linux 版本 GaussView，安裝好之後，輸入執行指令，範例是 `gv & (& : shift +7`，很重要請記得，這代表在背景下執行 GaussView 程式) 會看到 Gaussview 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` 可以看產生的輸入檔，要注意的是要顯示遠端圖型界面需要使用具備 x-windows 的連線軟體連線到計算主機，`mobaXterm` 具備此種功能。



b、第二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，再把結構複製貼過來 linux 計算主機端，設定計算的輸入檔，後面簡單介紹在 Linux 主機端上的輸入檔結構，基本上與 window 端的輸入檔非常相似。

4. 可以用 vi 編輯輸入檔(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。

```

%mem=2GB
%NprocShared=6
%chk=H2O
M062X/6-31+G(d,p) OPT FREQ
H2O water
0 1
H
O 1 R
H 2 R 1 A
R = 0 96
A = 104.5
~
~

```

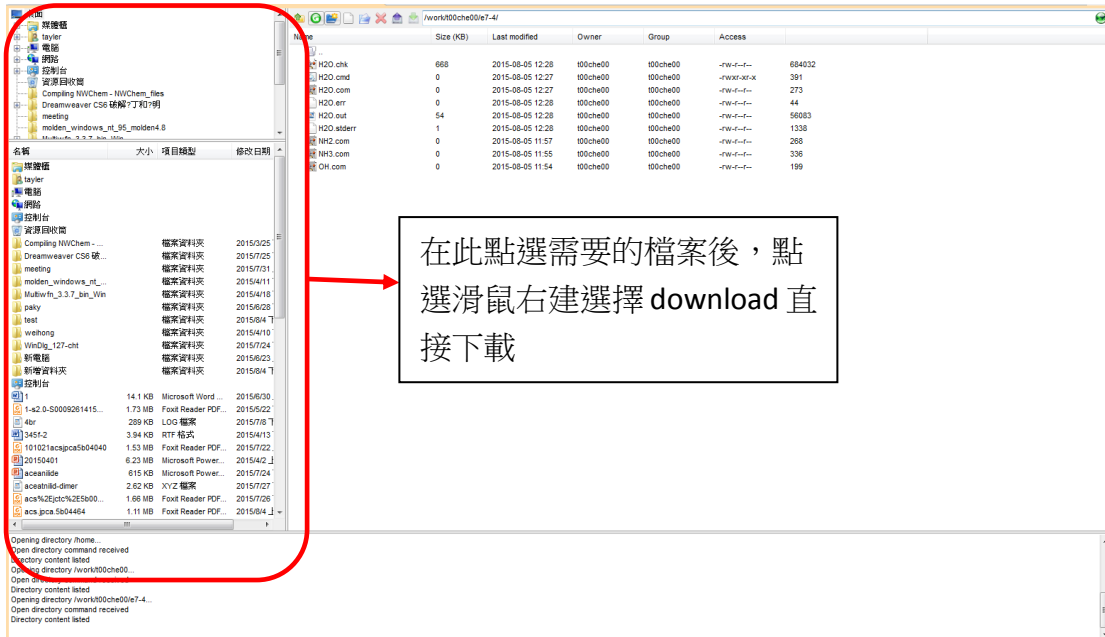
Annotations in the image:

- Use of core count and memory quantity: `%NprocShared=6`
- Gaussian temporary file name: `%chk=H2O`
- Calculation method and selection of calculation work type (such as single point, structure optimization): `M062X/6-31+G(d,p) OPT FREQ`
- Calculation work content description: `H2O water`
- Molecular total charge, multiplicity and structure: `0 1`
- Structure definition, here using Z-matrix coordinates, end with an empty line: `H`, `O 1 R`, `H 2 R 1 A`, `R = 0 96`, `A = 104.5`

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

6. 按照計算環境與效能設定章節說明的方式進行計算, 計算完後會產生預設的輸出檔 H2O.log, 或者使用自定義輸出檔名稱的指令也會產生不同的輸出檔格式, 如果是國網中新用戶要看你設定 PBS 排程檔案中輸出檔設定的檔名。回到 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

7. 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



使用國網中心 Taiwania 主機

1. 首先必須先到國網中心計算資源服務網申請帳號，網頁登入帳號跟計算主機帳號都必須申請。

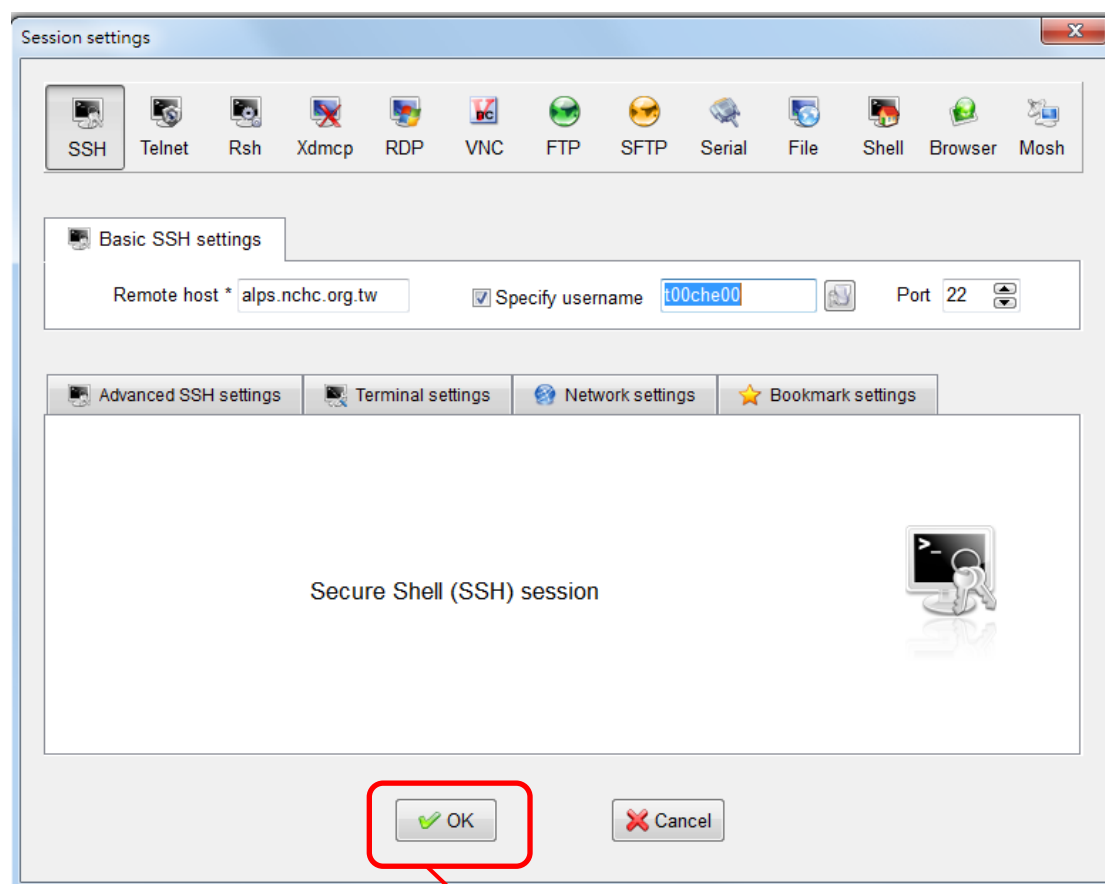
國網中心計算資源服務網：https://iservice.nchc.org.tw/nchc_service/index.php

2. 以使用 mobaxterm 軟體為例，點擊之後會出現如下畫面，Remote host 欄位輸入下列任一遠端位址，登入節點的電腦設定好 Gaussian 09 軟體環境變數設定後，可以直接以 Gaussian 09 原本指令做計算，Specific name 欄打勾並輸入帳號)，按 OK 登入並輸入密碼登入遠端主機，新的 Taiwania 主機必須提供自己設定的密碼+OTP，OTP 需要個人先向國網中心申請帳號，至國網中心計算資源服務網站，登入個人帳號後在主機帳號資訊內查看。

140.110.148.11 (clogin1.twania.nchc.org.tw)

140.110.148.12 (clogin2.twania.nchc.org.tw)

140.110.148.15 (glogin1.twania.nchc.org.tw，此為使用 GPU 計算登入端口)



按 OK 登入遠端工作站

- 會員資訊
 - 個人資料
 - 主機帳號資訊
 - 論文成果
 - 專利成果
- 計畫管理
 - 我的計畫
 - 我的訂單
 - 特殊服務申請

國網中心計算資源服務網個人主機帳號資訊 OTP 密碼取得

主機帳號
taylor1596(啟用)

主機密碼
修改主機密碼

OTP 認證碼
示



點我複製OTP金鑰

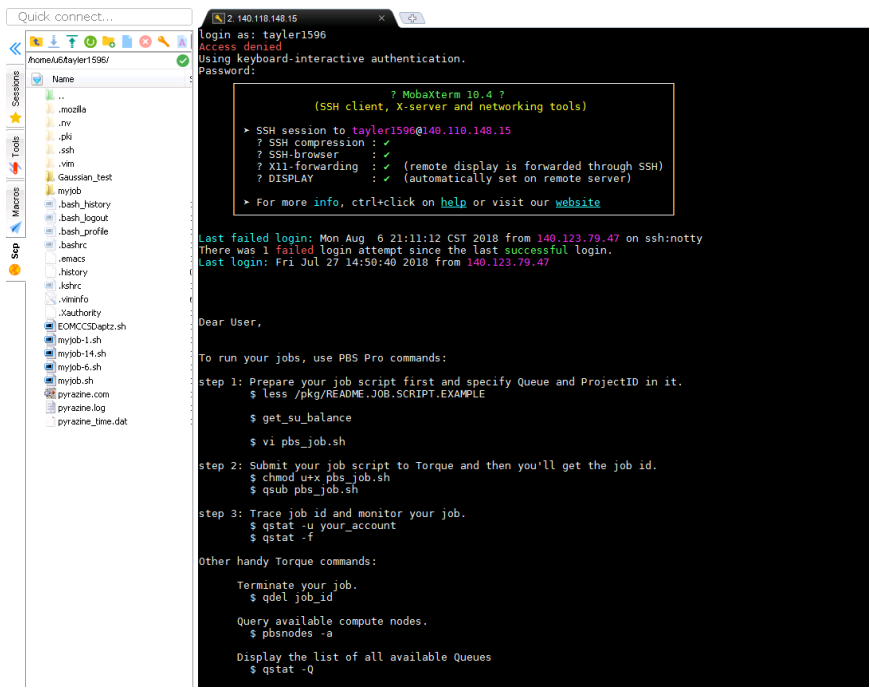
說明：

1. 以上是您未來登入主機之帳號資訊，此帳號如建立後，不提供更名之服務。
2. 為了讓您體驗及熟悉主機之環境，特別貼心的為初次申請者，自動提供台灣杉(Taiwania)主機免費使用的額度。
3. 未來如額度不敷使用時，敬請透過本服務網提出計畫申請及購買使用額度。
4. 登入台灣杉(Taiwania)主機時，需要輸入您的主機密碼加上本服務網提供的一次性密碼 (OTP)，密碼和OTP 之間不得有空白或是其他字元。
5. 要在電腦或行動裝置上快速查看 OTP，可以安裝下列推薦的 Authenticator，安裝後啟動應用程式並掃描上方認證碼旁 QR Code 或是輸入OTP金鑰即可快速查看。

安裝 Authenticator (查看安裝與操作說明)

<p>行動裝置版本 (使用行動裝置瀏覽本網頁時請點我安裝)</p> 	<p>電腦版本</p> <p>Authenticator for Windows (僅支援 windows 10，由 Microsoft Store 下載安裝)</p> <p>WinAuth (免安裝，支援 Windows 7 ~ 10，請依官方建議選擇合適版本)</p>
---	---

3. 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 送出登入後首先會看到下列畫面，這是使用者 home 目錄畫面：



```

login as: taylor1596
Access denied
Using keyboard-interactive authentication.
Password:

? MobaXterm 10.4 ?
(SSH client, X-server and networking tools)

> SSH session to taylor1596@140.110.140.15
? SSH compression : ✓
? SSH-browser : ✓
? X11-forwarding : ✓ (remote display is forwarded through SSH)
? DISPLAY : ✓ (automatically set on remote server)
> For more info, ctrl+click on help or visit our website

Last failed login: Mon Aug 6 21:11:12 CST 2018 from 140.123.79.47 on ssh:notty
There was 1 failed login attempt since the last successful login.
Last login: Fri Jul 27 14:50:40 2018 from 140.123.79.47

Dear User,

To run your jobs, use PBS Pro commands:

step 1: Prepare your job script first and specify Queue and ProjectID in it.
$ less /pkg/README.JOB.SCRIPT.EXAMPLE
$ get_su_balance
$ vi pbs_job.sh

step 2: Submit your job script to Torque and then you'll get the job id.
$ chmod u+x pbs_job.sh
$ qsub pbs_job.sh

step 3: Trace job id and monitor your job.
$ qstat -u your_account
$ qstat -f

Other handy Torque commands:

Terminate your job.
$ qdel job_id

Query available compute nodes.
$ pbsnodes -a

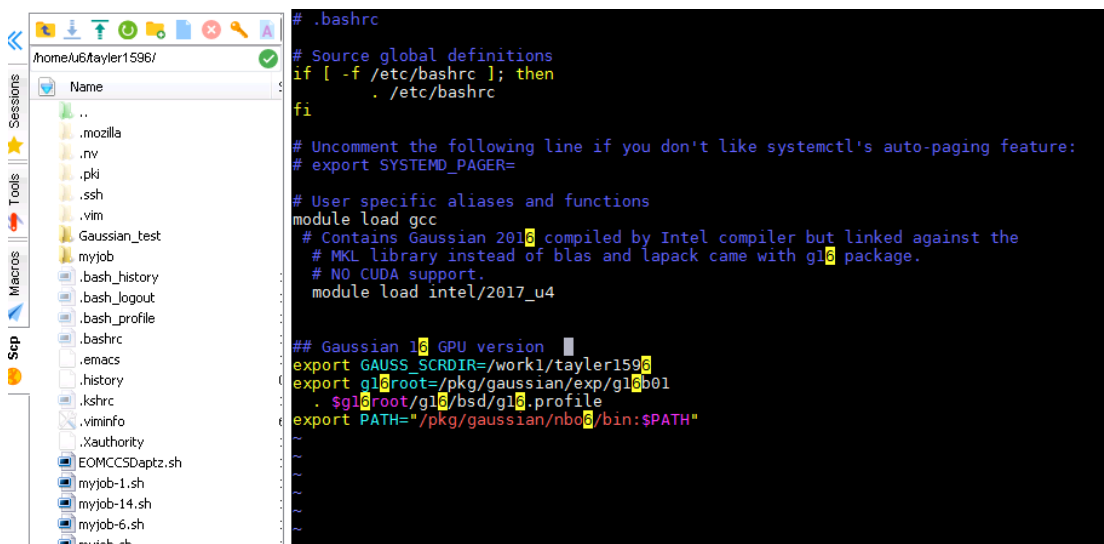
Display the list of all available Queues
$ qstat -Q
    
```

接下來需要設定 Gaussian 09/16 程式環境變數，可以使用下列指令查看設定方式，**less /pkg/gaussian/README.gaussian.jsyu**，目前國網提供 3 種 gaussian 16 版本以及一套 gaussian 09。

以 Gaussian 16 GPU 版本為例是

```
/pkg/gaussian/g06b01.gpu
# Contains Gaussian 2016 with CUDA support, default compilation.
export g16root=/pkg/gaussian/g16b01.gpu
. $g16root/g16/bsd/g16.profile
export PATH="/pkg/gaussian/nbo6/bin:$PATH"
```

接下來到使用者 home 目錄下，輸入 vi .bashrc，並把上面紅色部分設定加入，舉例來說如下，最後執行 source .bashrc，完成啟動設定參數，僅第一次登入需要設定。



```
#!/bin/bash
# Source global definitions
if [ -f /etc/bashrc ]; then
    . /etc/bashrc
fi

# Uncomment the following line if you don't like systemctl's auto-paging feature:
# export SYSTEMD_PAGER=

# User specific aliases and functions
module load gcc
# Contains Gaussian 2016 compiled by Intel compiler but linked against the
# MKL library instead of blas and lapack came with g16 package.
# NO CUDA support.
module load intel/2017_u4

## Gaussian 16 GPU version
export GAUSS_SCRDIR=/work1/taylor1596
export g16root=/pkg/gaussian/exp/g16b01
. $g16root/g16/bsd/g16.profile
export PATH="/pkg/gaussian/nbo6/bin:$PATH"
```

4. 新的 Taiwania 主機必須使用 PBS 排程系統來進行計算工作，首先必須先取得付費的計畫名稱，接下來需建構執行計算的 shell script 檔案 (XXX.sh)以及 gaussian 的輸入檔，再送入 shell script 檔案，詳細如下說明。

- i. 輸入下列指令可以看到參考的執行計算 shell script 檔案範例，按 **q** 可已退出。

less /pkg/README.JOB.SCRIPT.EXAMPLE

- ii. 輸入下列指令查詢計畫名稱 ProjectID

get_su_balance

```
[taylor1596@qlogin1 Gaussian_test]$ get_su_balance
142855,MST [redacted] 純氣化學及氫轉移動力學與多階電子結構計算之理論研究
[taylor1596@qlogin1 Gaussian_test]$
```

- iii. 建構執行計算 shell script 檔案，以建構 myjob.sh 為例，我們想以 Gaussian 16 計算一個 pyridine 的單點計算，首先準備一個 Gaussian 程式的單點計算輸入檔 pyrazine..com 如下。

```
%mem=1024MB
%NprocShared=8
%chk= pyrazine
# B3LYP/aug-cc-pVTZ OPT

pyrazine

0 1
C          -0.71022361   -1.14501699   0.00000000
C           0.71022361   -1.14501699  -0.00000000
N           1.42205120   -0.00000000   0.00000000
C           0.71022361    1.14501699   0.00000000
C          -0.71022361    1.14501699  -0.00000000
N          -1.42205120   -0.00000000   0.00000000
H          -1.28465960   -2.08621835   0.00000000
H           1.28465960   -2.08621835  -0.00000000
H           1.28465960    2.08621835   0.00000000
H          -1.28465960    2.08621835  -0.00000000
```

- iv. 輸入 vi myjob.sh，並輸入下列內容

```
#!/bin/bash
#PBS -l select=1:ncpus=8:ngpus=4 (select 選擇計算結點數目、ncpus 設定 CPU 使用數目，ngpus 設定 GPU 使用數目)
#PBS -q cf160 (指定要送入計算排程區域，需要查詢國網中心計算資源服務網的 Taiwania 使用說明手冊，這裡 cf160 是運算結點)
#PBS -N pyrazine (計算名稱，可以不需要)
#PBS -P MSTXXXXX (計畫名稱 ProjectID，XXXXX 為一組數字)
```

```
#PBS -o pyrazine.out ( 定義輸出檔名稱 )
#PBS -e pyrazine.err ( 定義錯誤紀錄檔 )
#cd $PBS_O_WORKDIR ( 到計算工作目錄 )
g16 < pyrazine.com > pyrazine.log 或者 g16 < pyrazine.com
( 執行 Gaussian 計算指令 )
最後輸入 wq 儲存離開。
```

詳細說明可以到國網中心計算資源服務網登入個人使用帳號後找到裡面常見問題與說明選項，裡面有完整的說明(如下圖顯示位置)。



國網中心計算資源服務網

(https://iservice.nchc.org.tw/nchc_service/index.php)

- v. 輸入 `chmod u+x myjob.sh` 使得 `myjob.sh` 具備執行權限，然後再輸入 `qsub myjob.sh` 執行計算。通常會顯示如下，

```
srvc1:
Job ID      Username Queue   Jobname   SessID  NDS  TSK  Req'd  Req'd  Elap
-----  -----  -----  -----  -----  ---  ---  ---  ---  ---
203623.srv  tayler15 gp4      pyrazine  --      1    8    --    96:00 Q  --
```

Job ID 當需要查詢計算結果時會需要，注意的是每種不同的計算排程區域有限制計算的時間，這點可以參閱計算資源服務網的 [Taiwania 使用說明手冊 PBS Pro job operation section](#)。

- vi. 可以使用下列指令查詢、刪除計算工作，以這裡為例 `qstat`

<code>qstat -u 帳戶名稱</code>	查詢計算工作進度，以這裡為例 <code>qstat -u tayler1596</code> 。
<code>qstat -f Job ID (數字部分)</code>	顯示詳細計算設定條件，含計算結果點相關資訊，以目前例子來說明是 <code>qstat -f 203623</code>
<code>qdel Job ID</code>	刪除計算工作，範例 <code>qdel 203623</code>

pbsnodes -a	顯示所有可以使用的計算結點目前的狀況
qstat -Q	查詢排程的狀況，包含總共可以容納的計算工作數目、目前的計算數量、正在排程的計算工作數量

5. 有任何 Taiwania 主機操作、計算問題可以詢問下列人員：

國網中心：
帳號申請問題：呂小姐
Email：account@nchc.narl.org.tw
電話：03-5776085 #442
技術支援服務：李先生
Email：service@nchc.narl.org.tw
電話：04-24620202 #845
中正大學化學暨生物化學系 (電話：05-2720411#61411)
胡維平教授 (email：chewph@ccu.edu.tw)
蔡承成助教 (email：tsai.chengcheng@gmail.com)
周政彥助教 (email：gary60068@gmail.com)