

TEMAT: URUCHOMIAMY PROGRAM GAUSSIAN NA KLASTRZE.

Spis treści:

1. Zasady ogólne.

- 1.1. Zainstalowana wersja oprogramowania Gaussian.
- 1.2. Lokalizacja instalacji Gaussian.
- 1.3. Domyślna lokalizacja zapisywania gaussianowskich plików tymczasowych.
- 1.4. Sprawdzenie dostępnych modułów na MS.
- 1.5. Wgranie modułu Gaussian.
- 1.6. Sprawdzamy poprawność wgrania modułu.

2. Uruchamianie programu Gaussian w systemie kolejkowym.

- 2.1. Informacje ogólne
- 2.2. Przykładowy pliku rGaussian.sh.
- 2.3. Wstawienie zadania do kolejki.

TEMAT: URUCHAMIAMY PROGRAM GAUSSIAN NA KLASTRZE.

1. Zasady ogólne.

1.1. Zainstalowana wersja oprogramowania Gaussian.

Gaussian 09 Rev D.01

Version: EM64T-SSE4/LINUX w/LINDA

1.2. Lokalizacja instalacji Gaussian.

/home/soft/gaussian/g09

1.3. Domyślna lokalizacja zapisywania gaussianowskich plików tymczasowych.

/home/soft/gaussian/scratch

1.4. Sprawdzenie dostępnych modułów na MS.

module avail

1.5. Wgranie modułu Gaussian.

module load gaussian

1.6. Sprawdzamy poprawność wgrania modułu.

which g09

2. Uruchamianie programu Gaussian w systemie kolejkowym.

2.1. Informacje ogólne

Zainstalowana wersja Gaussiana na klastrze może liczyć na jednym węźle (maksymalnie w zależności od wybranego węzła do 20 rdzeni). Domyślnie g09 jest uruchamiane na jednym rdzeniu. Wykaz dostępnej ilości rdzeni w zależności o wybranego węzła:

[nazwa węzła w klastrze]: maksymalna liczna ilość rdzeni.

- [phi-001 oraz phi-002]: po 20 rdzeni;
- [n-001 do n-010]: po 16 rdzeni.

TEMAT: URUCHOMIAMY PROGRAM GAUSSIAN NA KLASTRZE.

2.2. Przykładowy pliku rGaussian.sh.

```
#!/bin/bash -l

# MP2 i Freq itp należy w pliku wejściowym gaussian zwiększyć ilość (--> %mem)
# UWAGA!
# W przypadku zmiany w pliku wejściowym gaussian liczby procesorów (%nproc)
# KONIECZNIE!
# należy analogicznie zmienić wartość parametru ilości rdzeni ppn poniżej w parametrach
wejściowych dla systemu kolejowego.

#Parametry wejściowego dla systemu kolejowego opisane za pomocą PBS .
#PBS -l nodes=phi-002:ppn=8
#
# czas ZEGAROWY wykonania zadania: format: HH:MM:SS
#
#PBS -l walltime=336:00:00
#PBS -l pmem=16gb
#PBS -q long
#PBS -A GO-008

# * Wykaz dostępnej ilości rdzeni w zależności o wybranego węzła (patrz punkt 2.1.)

#Poniżej przedstawiono katalog składowania plików z zadaniami wejściowymi. W naszym
przypadku jest on, rozmieszczony w kartotece /home/$USER. Natomiast podkatalogi
/gaussian/exp/ mogą być dowolnie konfigurowane (zmieniane) użytkownikiem.
cd ~/gaussian/exp/

#Ustawienie zmiennych środowiskowych dla Gaussian
module load gaussian

#Podkatalog w /home/soft/gaussian/scratch/ na pliki tymczasowe
mkdir -p /home/soft/gaussian/scratch/$USER/$$
export GAUSS_SCRDIR=/home/soft/gaussian/scratch/$USER/$$
```

TEMAT: URUCHAMIAMY PROGRAM GAUSSIAN NA KLASTRZE.

#Poniżej opisany jest ogólny format uruchamiania gaussian z własnym zadaniem wejściowym .

Proszę wpisać zamiast zadanie.com i wyniki.log nazwę swojego „inputu” i „outputu”.

#Jeżeli mamy więcej krótkich zadań możemy powielić poniższą linie kilka razy z różnymi

zadaniami wejściowymi (inputami).

```
g09 zadanie.com wyniki.log
```

#gdzie:

„zadanie.com” – jest to przykładową nazwą „inputu” z zadaniem obliczeniowym gaussian.

zakomentuj poniższą linię, jeżeli chcesz zachować pliki tymczasowe

```
rm -fr /home/soft/gaussian/scratch/$USER/$$/
```

2.3. Wstawienie zadania do kolejki.

```
# qsub rGaussian.sh
```