Gaussian

Envio local, exemplos de scripts

Informações sobre o uso direto do cluster local estão em [[SLURM|aqui]].

SMP

```
#!/bin/bash
#SBATCH -t 5:00 -c 8

module load gaussian
goo-job-nanny g09 gaussian-smp.com
```

Linda (paralelo multi nós)

```
#!/bin/bash
#SBATCH -n 16 -t 5

module load gaussian
. linda_set_env
goo-job-nanny g09 gaussian-linda.com
```

Submissa Simplificada

{{include(SubmissaoSimplificadaCabecalho)}}

Exemplo:

```
APP=gaussian
CASE=caso
HOSTS=4
```

Essa submissão espera o arquivo de entrada "caso.com". O arquivo .log será atualizado a cada 15 minutos. O checkpoint .chk será copiado a cada 3 horas.

Lembre de ativar os check points no arquivo do Gaussian com a linha "%chk=caso.chk"

Mais informações sobre checkpoints: http://help.unc.edu/4520
Parâmetros:
- CASE - Nome do caso. Define o nome de arquivos de entrada, log e saida. **Padrão:** (nome do arquivo de parâmetros, sem a extensão)
- HOSTS - Número de hosts (processos) para a execução. **Padrão:** 1

{{include(SubmissaoSimplificadaRodape)}}