
Uso eficiente de Gaussian03: g03mem

- Modificado (29.12.2005)

Mandar trabajos de Gaussian03 a cola de ejecución en los servidores de cálculo del CESGA supone realizar una estimación más o menos precisa de los recursos que se van a utilizar. El script g03mem da una estimación aproximada de los recursos requeridos por un trabajo de Gaussian 03 en concreto.

La sintaxis de este comando es:

```
g03mem fichero_de_input
```

Este script calcula el número de bases y da una estimación de CPU/memoria/disco requeridos para la ejecución con diferentes algoritmos. Adicionalmente cuando encuentra la palabra clave freq dentro de la ruta del trabajo ejecuta la utilidad freqmem adecuadamente.

Ejemplo:

```
g03mem /opt/cesga/g03/tests/com/test135.com
```

Este script está en fase experimental y existen casos aún no soportados (oniom, force ...). Adicionalmente no es descartable la presencia de bugs por lo que si se encuentra algún comportamiento erróneo así como para cualquier sugerencia al respecto, por favor comuníquenoslo a

(c) CESGA 2005

Autor: Aurelio Rodríguez

g03mem. Estimación de recursos para Gaussian 03. Version beta 0.1

Trabajo cofinanciado por el FSE (Fondo Social Europeo)