
Uso eficiente de Gaussian03: g03mem

- Actualizado (29.12.2005)

Mandar traballos de Gaussian03 a cola de execución nos servidores de cálculo do CESGA supón realizar unha estimación máis ou menos precisa dos recursos que se van utilizar. O script g03men dá unha estimación aproximada dos recursos requiridos por un traballo de Gaussian 03 en concreto.

A sintaxe deste comando é:

g03men fichero_de_input

Este script calcula o número de bases e dá unha estimación de CPU/memoria/disco requiridos para a execución con diferentes algoritmos. Adicionalmente cando atopa a palabra chave freq dentro da ruta de traballo executa a utilidade freqmen adecuadamente.

Exemplo:

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

Este script está en fase experimental e existen casos aínda non soportados (oniom, force...). Adicionalmente non é descartable a presenza de bugs polo que se se atopa algún comportamento erróneo así como para calquera suxerencia ao respecto, por favor comuníquenolo a .

(c) CESGA 2005

Autor: Aurelio Rodríguez

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

Traballo cofinanciado polo FSE (Fondo Social Europeo)