

Gaussian



- - [Opis](#)
 - [Verzije](#)
 - [Službena dokumentacija](#)
 - [Primjeri](#)
 - [Korištenje skripte dog.mem](#)

Opis

Gaussian je komercijalna računalno-kemijska aplikacija općenitog tipa, širokog spektra primjena, s nizom metoda za kvantno-mehaničko modeliranje.

Može koristiti za modeliranje molekularne strukture, dinamike, optičkih i spektroskopskih svojstava molekula, kao i za predviđanje kemijskih reakcija.

! Gaussian je dostupan isključivo zaposlenicima i suradnicima Sveučilišta u Zagrebu.

! Gaussian prilikom paralelizacije radi s **dijeljenom memorijom**, odnosno nema mogućnost širenja van jednog računalnog čvora.

Verzije

Verzija	Modul	Supek	Padobran
16 (rev. C01)	scientific/gaussian/16-C01	✓	✓

Službena dokumentacija

- <https://gaussian.com/man/>
- <https://gaussian.com/videos/>

Primjeri

U primjeru niže, aplikacija će se pokrenuti na 8 procesorskih jezgri.

- ✓ Aplikacija se pokreće pomoću **dog** skripti koje u Vašu okolinu postavljaju sve potrebne varijable (pa tako i broj traženih procesorskih jezgri) te pozivaju i samu izvršnu datoteku.

Bash skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=1:ncpus=8:mem=2gb

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/gaussian/16-C01

dog input.com
```

Korištenje skripte dog.mem

dog.mem je proširena **dog** skripta koja automatski ukomponira korištenje **%Mem** opcije, odnosno interne Gaussianove varijable **GAUSS_M DEF**.

Konkretno, od ukupno zatražene memorije u zaglavlju PBS skripte, Gaussian će se ograničiti na alociranje 75 % zatraženog iznosa. Tako će za zatraženih 32 GiB, Gaussian ograničiti na alociranje 25770 MB.

Bash skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=1:ncpus=16:mem=32gb

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/gaussian/16-C01

dog.mem input.com
```

run.sh.o1654

```
G16 is running on 16 CPU cores, allocating a
maximum memory (RAM) of 25770 MB.
Input-file: input.com
```