

Pilgrim

- [Opis](#)
- [Službena dokumentacija](#)
- [Verzije](#)
- [Napomene](#)
- [Primjer korištenja](#)
 - [Gaussian](#)
 - [ORCA](#)

Opis

Pilgrim je računalno-kemijska aplikacija napisana u Pythonu, osmišljena za izračunavanje konstanti brzine kemijskih reakcija i simulaciju mehanizama kemijske kinetike. Pilgrim radi u "suradnji" s drugim aplikacijama za izračun elektronske strukture, odnosno **Gaussianom** i **ORCA-om**.

Službena dokumentacija

- <https://github.com/cathedralpkg/Pilgrim>

Verzije

Verzija	Modul	Podrška	Supek	Padobran
2021.5	scientific/pilgrim/2021.5	CPU	✓	✗

Napomene



Aplikacija je prilagođena da radi s postojećim Gaussian (**dog.mem**) i ORCA (**runorca.mpi**) *wrapperima* na Supeku, stoga nije potrebno prethodno prilagođavati input datoteke traženim resursima.

Više o tome na pripadajućim stranicama:

- [Gaussian - Napredno računanje - wiki.srce.hr](#)
- [ORCA - Napredno računanje - wiki.srce.hr](#)

Primjer korištenja

Gaussian

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=1:ncpus=8:mem=16gb
#PBS -j oe

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load "scientific/pilgrim/2021.5"

pilgrim.py --gather
pilgrim.py --path --software gaussian
```

ORCA

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=8:mem=2gb
#PBS -l place=pack
#PBS -j oe

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load "scientific/pilgrim/2021.5"

pilgrim.py --gather
pilgrim.py --path --software orca
```