



Gaussian ve Linda

Gaussian , elektronik yapı metotlarının ve daha önceleri erişilmez olan molekül tiplerinin incelenmesinde kolaylıklar sağlayan aynı zamanda eski metotlarda performans artışı yaratan bir elektronik yapı programıdır. Bu program kimyagerler, kimya mühendisleri , fizikçiler ve diğer araştırma grupları tarafından kullanılmaktadır.

Sistemimizde Gaussian 03 ve Linda kuruludur.

* Kurulum `/SFS/progs/gaussian/` dizini altına yapılmıştır.

* Scratch dizini `/SFS/progs/gaussian/scratch` olarak ayarlanmıştır.

* Bir kullanıcının gaussian+linda kullanabilmesi için aşağıdaki adımların yapılmış olması gerekmektedir:

1- Kullanıcı gaussian grubunun (103) üyesi olmalıdır.

2- Kullanıcının varolan `~/.bash_profile`, `~/.bash_login`, or `~/.profile`. dosyalarından birine:

```
g03root=/SFS/progs/gaussian
GAUSS_SCRDIR=/SFS/progs/gaussian/scratch
export g03root GAUSS_SCRDIR
. $g03root/g03/bsd/g03.profile
```

satırları yazılı olmalı.

3- gaussian dosyası olan `<dosyaadi>.com` dosyasına aşağıdaki 2 satır eklenmelidir:

```
%NProcShared=4
%NProcLinda=3
```

Burada

```
NProcShared= <makina basına dusen core sayisi>
NProcLinda= <kac makina kullanılacak>
```

anlamlarına gelmektedir.



(Örneğin 8 işlem kullanacak bir iş verilecekse `%NProcShared=4`, `%NProcLinda=2` şeklinde tanımlanmalıdır.)

4- Gaussian+linda işlerini çalıştırmak için aşağıdaki `linda.lsf` betiği kullanılmalıdır:

```
#!/bin/bash
# -----
# Bu script UYBHM sisteminde Gaussian/Linda çalıştırmak için
# yaratılmıştır.
# Version      : v1.0
# Hazırlayan   : Ozden AKINCI [ akinci@be.itu.edu.tr ]
# -----
#

#BSUB -a linda          # bu kısmi değiştirmeyin !!!
#BSUB -J LINDA          # LSF iş ismi
#BSUB -o %J.out         # LSF stdout dosyası ismi
#BSUB -e %J.err         # LSF stderr dosyası ismi
#BSUB -n 12             # işlemci sayısı

#işlemci sayısı com dosyasında tanımlanan
#%NProcShared ve %NProcLinda değerleriyle tutarlı olmalı!
#
#%NProcShared=4
#%NProcLinda=3
# değerleri için -n 12 olarak tanımlanmalıdır.

#BSUB -q trccsq        # kuyruk ismi [kullanıcının ismi olan kuyruk]
#
# Aşağıdaki satırları değiştirmeyin!
# -----
# gecici host dosyalarının silinmesi
rm -f tsnet.nodes .tmp.hostfile

# makina isimlerinin belirlenmesi
np=`echo $LSB_HOSTS`
#yeni makina dosyasının oluşturulması
for i in $np
do
echo $i >> .tmp.hostfile
done
uniq .tmp.hostfile > tsnet.nodes
```



```
#hangi linda?  
LINDA=/SFS/progs/gaussian/g03/bsd/g031  
  
#linda icin cevre degiskenlerinin ayarlanmasi  
export GAUSS_FLAGS='-nodelist -opt "Tsnet.Node.lindasharg:ssh" '  
# -----  
# Asagidaki satirda ilgili com dosyasini yaziniz.  
  
${LINDA} test.com
```

5- LSF sistemine isin verilmesi

```
bsub < linda.lsf
```

ile program LSF sistemine verilir.