

Gaussian 快速用户指南

2009 年 9 月

中国科学院计算机网络信息中心超级计算中心

提示:

1. 要求使用 **bsub** 提交作业，详情请见 [/home_soft/doc/Lenovo7000-quickref.pdf](#) 最后一节。
2. Gauss 在 SMP 架构上并行效率高，而且是 Gauss 程序内嵌的功能，所以建议尽量用 SMP 架构来并行。DMP 并行是通过 Linda 来实现的，并行效率相对低。并行效率角度来分析，SCF 计算的并行效率高。而其他如频率计算并行效率低。

软件信息

- 平台: x86_64 和 IA64
- 版本: Gaussian 03
- Licence 要求: X86_64 版本每个节点最多启动 8 个进程。

设置环境变量范例

- LSF 系统已经设置好环境变量，用户无需单独设置。
- 对于有读写性能要求的算例，可以自行更改 \$HOME/.bashrc 文件，增加

```
export GAUSS_SCRDIR=YOUR/OWN/PATH
```

否则默认为提交作业时的当前目录。

禁止使用 /tmp 做为 GAUSS_SCRDIR，作业脚本会提示出错。

bsub 提交作业范例（请根据需要修改相应参数）

IA64 版

- 串行任务

```
bsub -W 5 -n 1 -q altix_dbg -o %J.out -e %J.err g03_smp.lsf test_smp397.com
```

- 并行任务

SMP（共享式内存并行任务）
首先，在输入文件中加入如下一行，“%nprocshared=N”。
然后，挑选合适队列用下列命令提交：

```
bsub -W 5 -n N -R "span[hosts=1]" -q altix_dbg -o %J.out -e %J.err g03_smp.lsf  
test_smp397.com
```

x86_64 版

- 串行任务

```
bsub -W 5 -n 1 -q x64_dbg -o %J.out -e %J.err g03.lsf test397.com
```

- 并行任务

0 SMP（共享式内存并行任务）

首先，在输入文件中加入如下一行，“%nprocshared=N”，其中 N 是该计算所用到的 CPU（或者核）数目，**要求不大于 8**。
然后，挑选合适队列用下列命令提交：

```
bsub -W 5 -n N -R "span[hosts=1]" -q x64_dbg -o %J.out -e %J.err g03.lsf INPUTFILE
```

0 DMP（分布式内存并行任务）。

首先，在输入文件中加入如下两行，
%nproclinda=M # M 是该计算用到的节点数目
%nprocshared=N # N 是每个节点用到的 CPU（或者核）数目，**要求不大于 8**
然后，挑选合适的队列，用下列命令提交：

```
bsub -W 5 -n M*N -R "span[ptile=M]" -o %J.out -e %J.err -q x64_dbg g031.lsf  
test_dmp397.com
```

由于 linda 的使用比较灵活，当前这种提交作业的方式只是比较通用的方式之一，如有特殊要求，请自行定制提交作业的脚本，或者联系超算中心的 support@sccas.cn。

常见问题

- **buffer allocation ERROR**

buffer allocation failed in ntrestl, err 文件: buffer allocation failed in ntrestl.:
Cannot allocate memory

这类问题一般是在 sgi 上的 node1 or node2 上并且是在用户目录下运行出的错，这两个节点访问 \$HOME 有点特别，所以造成了这类的错误。根本愿意是由于文件系统导致的，目前没有完美的解决方法，仅提供以下的方案，不分先后顺序，完全根据个人喜好。

x64 平台: 可以考虑用 x64 平台的 gaussian, /home_soft/doc/Business_soft/Quick User Guide - Gaussian.doc 是文档。

IA64 平台:

1. 更换运行的主目录。登录到 head 后，可以看到 /workspace/gaussian_workspace，这个目录目前是 gauss 组的用户可以写。用户可以在这个目录下建立自己的子目录，然后把例子放到下面，按照原来的方式执行即可。
2. 可以指定在 head 上用 IA64 版跑。bsub -n 2 -m "head " -q altix_dbg g03_smp.lsf your.com。这个方案只能跑在 altix_dbg 队列，15 分钟。