

# Qchem 快速用户指南

2009 年 5 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。

## 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 QCLOCALSCR=YOUR/OWN/PATH
```

## bsub 提交作业范例（请根据需要修改相应参数）

- 串行任务

```
bsub -W 5 -n 1 -q x64_dbg -e %J.err -o %J.out qchem.lsf ftc_alanine10.in ftc_alanine10.out
```

- 并行任务

```
bsub -W 5 -n 2 -q x64_dbg -e %J.err -o %J.out qchem.lsf ftc_alanine10.in ftc_alanine10.out
```