

Como submeter processos no Gaussian

08/14/2024 06:41:14

[FAQ Article Print](#)

Category:	HPC - High Performance Computing	Votes:	0
State:	public (all)	Result:	0.00 %
Language:	pt_BR	Last update:	16:00:18 - 12/19/2016 (America/Sao_Paulo)

Keywords

HPC computação alto desempenho

Dúvida (ou problema) (public)

Como submeter processos no Gaussian

Resposta (ou solução) (public)

Exemplo de job:

```
#!/bin/bash -v
#PBS -N gauss_job
#PBS -j oe
#PBS -l ncpus=1
#PBS -q short
g03root="/usr/local"
GAUSS_SCRDIR="/scratch/usuario/gauss"
export g09root GAUSS_SCRDIR
. $g09root/g09/bsd/g09.profile
cd /scratch/usuario/gauss
g09 test000.com
```