

## Alguns cálculos gaussian não terminam corretamente. O que pode ser feito a respeito

26/04/2024 23:43:52

[Imprimir artigo da FAQ](#)

<b>Categoria:</b>	HPC - High Performance Computing	<b>Votos:</b>	0
<b>Estado:</b>	público (todos)	<b>Resultado:</b>	0.00 %
<b>Idioma:</b>	pt_BR	<b>Última atualização:</b>	Seg 19 Dez 15:59:48 2016 (America/Sao_Paulo)

### Palavras-chave

HPC computação alto desempenho

### Dúvida (ou problema) (público)

Alguns cálculos gaussian não terminam corretamente. O que pode ser feito a respeito

### Resposta (ou solução) (público)

O gaussian foi compilado com o compilador Intel, e em alguns casos, não termina a execução dos cálculos. Entramos em contato com o suporte gaussian, que nos informou que eles não dão suporte ao compilador Intel, apenas para o compilador Portland. Como não temos o compilador Portland, e rodar em 1 CPU resolveu o problema para usuários que não tinham seus cálculos terminados, passamos esta sugestão para todos que tem este problema:

Alterar a primeira linha do arquivo de entrada para:  
- %nprocshared=1

e, no job, solicitar 1 CPU na linha:  
- #PBS -l nodes=1:ppn=1