

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

11/07/2024 06:03:38

[FAQ Article Print](#)

<b>Category:</b>	HPC - High Performance Computing	<b>Votes:</b>	0
<b>State:</b>	public (all)	<b>Result:</b>	0.00 %
<b>Language:</b>	pt_BR	<b>Last update:</b>	15:59:48 - 12/19/2016 (America/Sao_Paulo)

### Keywords

HPC computação alto desempenho

### Dúvida (ou problema) (public)

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

### Resposta (ou solução) (public)

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