

iDove

博客园 首页 新随笔 联系 订阅 管理

搭建高性能计算环境（九）、应用软件的安装之gaussian 09

高斯软件一般使用的都是编译好的二进制版，所以解压缩后设置一下环境变量就可以用了。

```
cd /opt
tar xvf g09.tar.gz
```

设置环境变量，添加到/etc/profile文件中，重新登录后生效。

```
export g09root=/opt
source $g09root/g09/bsd/g09.profile
export GAUSS_SCRDIR=/tmp
```

有一点需要注意：

g09程序对访问权限有要求，如果高斯程序的权限允许组外用户访问，则会提示如下错误：

```
Files in the Gaussian directory are world accessible.
This must be fixed.
```

所以如果有多个用户需要使用高斯软件的话，建议单独创建一个gauss组，然后所有要使用软件的用户都加入gauss组。

groupadd gauss	新建gauss组
chgrp -R gauss /opt/g09	将g09软件的所属组改为gauss
groupmems -g gauss -a test	将test用户加入gauss组
groupmems -g gauss -l	显示gauss组中所有用户的用户名

测试：

高斯的软件包中自带了很多测试算例，将其中的test397复制到当前目录中，计算一下。

```
cp /opt/g09/tests/com/test397.com .
g09 test397.com
```

程序正常计算完成说明软件安装成功。

分类: [HPC](#), [Linux](#)

标签: [gaussian](#), [g09](#), [量化计算](#)

好文要顶 关注我 收藏该文



 iDove  
关注 - 1  
粉丝 - 5

10

+加关注

« 上一篇: [搭建高性能计算环境（八）、应用软件的安装之gromacs](#)  
» 下一篇: [搭建高性能计算环境（十）、应用软件的安装之Wien2k](#)

posted @ 2014-11-22 11:37 iDove 阅读(597) 评论(0) 编辑 收藏

刷新评论 刷新页面 返回顶部

注册用户登录后才能发表评论，请 [登录](#) 或 [注册](#)，[访问网站首页](#)。

- 【推荐】50万行VC++源码：大型组态工控、电力仿真CAD与GIS源码库
- 【活动】硅谷IT教育平台Udacity邀请您来免费上课
- 【推荐】移动直播百强八成都在用融云即时通讯云
- 【推荐】报表开发有捷径：快速设计轻松集成，数据可视化和交互

公告

昵称: iDove  
园龄: 1年9个月  
粉丝: 5  
关注: 1  
[+加关注](#)

< 2016年9月 >						
日	一	二	三	四	五	六
28	29	30	31	1	2	3
4	5	6	7	8	9	10
11	12	13	14	15	16	17
18	19	20	21	22	23	24
25	26	27	28	29	30	1
2	3	4	5	6	7	8

搜索

找找看

谷歌搜索

常用链接

- [我的随笔](#)
- [我的评论](#)
- [我的参与](#)
- [最新评论](#)
- [我的标签](#)

我的标签

- [HPC\(6\)](#)
- [md\(3\)](#)
- [linux\(2\)](#)
- [lammps\(1\)](#)
- [mpi\(1\)](#)
- [MS\(1\)](#)
- [ssh\(1\)](#)
- [vasp\(1\)](#)
- [分子动力学\(1\)](#)
- [量化计算\(1\)](#)
- [更多](#)

随笔分类

- [Hadoop](#)
- [HPC\(9\)](#)
- [Linux\(5\)](#)

【推荐】网易云信-一天开发一个微信，独创1对1技术顾问让开发加速



#### 最新IT新闻:

- 张旭豪最新内部讲话: 饿了么怎么看友 (he) 商 (bing) ?
  - 携程发行7.5亿美元可转债及2250万股美国存托凭证
  - 通用电气斥资14亿美元收购欧洲两家3D打印公司
  - 百度否认与新美大进行合并谈判 从未聘请华兴资本
  - 腾讯昨日成亚洲市值最高公司, 今日股价继续上涨成全球十大市值公司
- » 更多新闻...



#### 最新知识库文章:

- 程序猿媳妇儿注意事项
  - 可是姑娘,你为什么要编程呢?
  - 知其所以然 (以算法学习为例)
  - 如何给变量取个简短且无歧义的名字
  - 编程的智慧
- » 更多知识库文章...

#### 随笔档案

2014年11月 (10)

#### 最新评论

1. Re:搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP

非常感谢楼主的详细安装信息,按照楼主的方法成功的安装了MS,但是在编译VSAP时报错。报错信息如下: ./preprocess base.f90 - DHOST=\"LinuxIFC\" -DCACHE.....

--安风琴

2. Re:搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP

非常感谢楼主,我找了好久,没想到楼主这里写的这么详细! 一定要顶上去!!

--huoxing487

3. Re:搭建高性能计算环境 (一)、Linux操作系统的安装和配置

博主,你真辛苦,这里的10篇笔记对我们做计算的人来说,是极大的帮助。只是第一,二篇的图片不能显示。

--coffeetan

#### 阅读排行榜

1. 搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP(989)
2. 搭建高性能计算环境 (三)、安装intel编译器和mpi(909)
3. 搭建高性能计算环境 (九)、应用软件的安装之gaussian 09(596)
4. 搭建高性能计算环境 (八)、应用软件的安装之gromacs(565)
5. 搭建高性能计算环境 (五)、应用软件的安装之Amber12(528)

#### 评论排行榜

1. 搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP(2)
2. 搭建高性能计算环境 (一)、Linux操作系统的安装和配置(1)

#### 推荐排行榜

1. 搭建高性能计算环境 (四)、应用软件的安装之VASP(1)
2. 搭建高性能计算环境 (十)、应用软件的安装之Wien2k(1)
3. 搭建高性能计算环境 (九)、应用软件的安装之gaussian 09(1)