



# Centro Federal de Educação Tecnológica de Minas Gerais

## Grupo de Química para Simulações *In Silico*

Manual de uso dos *scripts*

Heitor Leite

### Introdução

Scripts são arquivos contendo sequências de comandos a serem executados pelo sistema a fim de realizar alguma tarefa.

### Instalação

O script de instalação baixa e instala automaticamente a última versão disponível dos scripts. Ele pode ser acessado na página [git.io/scripts\\_ic](https://git.io/scripts_ic). Para executá-lo basta usar o seguinte comando:

```
source <(curl -sL git.io/scripts_ic)
```

### Descrição

#### **substitui**

Substitui um elemento e sua multiplicidade em todos arquivos `.inp` de um diretório e seus subdiretórios.

#### **verifica**

Verifica se o cálculo de um arquivo `.out` foi bem sucedido e faz a análise vibracional.

### **gera\_\_script\_\_srm**

Gera um script `.srm` que pode ser submetido ao comando `sbatch` para todo arquivo `.inp` de um diretório e seus subdiretórios.

### **lista\_\_jobs**

Lista os *jobs* do usuário atual no *slurm* mostrando o nome completo de cada *job*.

### **gera\_\_csv**

Verifica o resultado de todos os arquivos `.out` de um diretório e seus subdiretórios e gera uma tabela `.csv` com os dados relevantes (energia eletrônica, energia livre de gibbs e entalpia total).