

Gaussian 并行计算的简单实现

技能要求

三年以上计算机使用经验，了解操作系统的概念，熟悉 Linux 或手头上有本 Linux 入门级的书。会上网查资料和在 BBS 上问问题。会使用 Gaussian。如果熟悉一些网络协议和基本原理更好。

一。硬件：

- 1: P42.8G/1G ram/120G HD
- 2: Ce2.0G/768M ram/80G HD

二。操作系统：

WinXP pro, Redhat Linux(Fedora Core 1, 从网上下载的光盘镜像(.iso 文件))

三。软件：

- VMware 5.0 30 天体验版 <http://www.vmware.com>
Linda 7.1 4 节点免费版 <http://www.lindaspaces.com>
Gaussian98 并行版（已编译好）

软件说明：

VMware 是一款口碑不错的虚拟机软件，这个软件运行在一个操作系统上，可以模拟出一个硬件环境，然后将另外一套操作系统安装到这个模拟的环境中。

Linda 是 Gaussian 并行计算所需要的一个在计算机节点间进行通讯，传输计算数据和控制指令的软件。

我得到的 Gaussian 是已经编译好的版本，不知道是在什么环境下编译的，但是可以在 Fedora Core 1 下运行。

以上软件的详细介绍见各自的官方网站。

四。安装步骤

1.安装 VMware

如果你想直接在一台机器上安装 Linux，则可以跳过 1,2 部分。

通过一下这个网址按要求注册后可以获得 30 天体验版的 VMware5.0:

http://www.vmware.com/vmwarestore/newstore/wkst_eval_login.jsp

注册后 vmware 网站会给你注册的 email 发一封信，其中有安装需要的序列号。同时会给出下载链接。

2.在 vmware 中创建 Linux 虚拟机

菜单 File->New->Virtual Machine。Virtual machine configuration 选 Custom。

Virtual machine format 选 New - workstation5。

Guest operation system 就是你要安装的操作系统的类型，选 Linux

Memory 的设置要尽可能大些。一般可以指定自己机器一半的内存。

Network connection 我选择的是 bridged，这样你安装的操作系统和你的网络上的机器具有相同的网络环境，网络设置上也和你自己用的机器类似，就是 IP 地址不同。

注意最后设置 Disk file 时，一定要自己指定 Disk file 的路径到一个剩余空间最大的驱动器，在本例中，disk file 将达到 2G 多的大小。

其他选项默认就可以了。

3.安装 Linux

注：这一部分及以下部分需要 Linux 基础知识才能看懂。

双击 Devices 那一栏中的 CD-ROM, Connection 中选 Use ISO image, browse 到 Linux 第一张光盘的镜像文件。然后 Start this virtual machine.

Linux 的安装不再详述，这方面网上的资料很多，只需注意如果你硬盘空间足够大，选择安装所有模块就可以了，这样省事。如果空间有限，注意安装几个和 C 有关的编译器，以及 rlogin,rsh,rexec,telnet 这些服务一定要安装。如果对 linux 不是很熟练，建议把所有的管理工具和系统设置工具也装上。

4.安装 Gaussian

我得到的是编译好的版本，所以无需再次编译，直接解包解压缩就可以了。我把解包后的文件夹放到了/usr 目录下。目录结构大概如下：

```
/usr/g98  
/usr/g98/bsd  
/usr/g98/linda-exe
```

```
.  
. .  
.
```

5.安装 Linda

下载的 Linda 是 rpm 文件，在图形界面中双击就自动安装了，默认安装到

```
/usr/sca
```

目录下，我忘了字符模式下的安装方法。

6.设置 Linux 的 rlogin

这是很重要的一部分，最终的目标就是在控制台中输入 rlogin nodeN 就可以直接登录到主机名为 nodeN 的计算机上。达到这个目的有以下几个要求。

- 1) 所有节点机的用户名和密码必须相同，而且用户名不能为 root。
- 2) 所有节点机的 gaussian 和 linda 必须装在完全相同的目录下。
- 3) /etc/hosts 中包括所有节点机的 IP 和主机名，格式如下：

IP 主机名

例如：

```
192.168.0.2 node1  
192.168.0.3 node2  
192.168.0.4 node3
```

```
..  
..  
..
```

- 4) /etc/hosts.equiv 中包括所有节点机的主机名，格式如下：

主机名

例如：

```
node1  
node2  
node3
```

```
.  
. .  
.
```

5) /home/你的用户名/.rhosts 中的内容与/etc/hosts.equiv 中的相同

6) /etc/securetty 这个文件中加入以下几行:

```
rlogin
```

```
rsh
```

```
rexec
```

这时候在这台机器上输入:

rlogin 这台机器的主机名

就应当可以不提示输入密码登录。

7. 设置 Linda

只需要一个文件，在/home/你的用户名/.tsnet.config 中输入所有的节点的主机名，和 /etc/hosts.equiv 中的内容一样。

8. 设置计算节点

在/home/你的用户名/下建立一个文件，名字任意，内容为你在计算中将要用到的节点。格式与/etc/hosts.equiv 中的相同。在本例中这个文件为.tsnet.nodes。如下箭头所指处。

9. 设置运行环境

在/home/你的用户名/.bashrc 文件的最后加入以下内容:

```
export PATH=${PATH}:"/"
export g98root=/usr
export PATH=${PATH}:"${g98root}/sca/linda7.1/intel-linux2.4-ws3/bin"
export LINDA_PATH="${g98root}/sca/linda7.1/intel-linux2.4-ws3/bin"
. ${g98root}/g98/bsd/g98.profile
```

在/home/你的用户名/.bash_profile 文件的最后加入以下内容:

```
export GAUSS_LFLAGS="-nodefile /home/你的用户名/.tsnet.nodes" <--
export g98root=/usr
export PATH=${PATH}:"/"
export PATH=${PATH}:"${g98root}/g98/linda7.1/intel-linux2.4-ws3/bin"
export LINDA_PATH="${g03root}/g03/linda7.1/intel-linux2.4-ws3/bin"
. ${g98root}/g98/bsd/g98.profile
```

注意以上两个内容应用到你的系统中时需要修改相应的路径。

五. 复制系统

完成以后工作后将 Linux 操作系统关闭，退出 VMware，然后将虚拟机文件的整个文件夹以及扩展名为 vmdk 的 Disk file（一般为 4 个：机器名.vmdk，机器名-s001.vmdk，机器名-s002.vmdk，机器名-s003.vmdk）拷贝到另外一台也安装了 VMware 的机器上，注意修改虚拟机文件 redhat.vmx 中 diskfile 的路径，以及机器名.vmdk 中其他三个文件的路径。复制完成后打开 vmware，选择 File->Open，browse 到复制的机器名.vmdk，打开。将网卡删除后再添加一块新的网卡（要不然会因为 mac 地址和原来的相同而发生冲突。）启动系统，利用系统设置工具修改 IP，主机名。依次操作，然后将所有的节点机都打开，看能否相互无密码 rlogin。

在机器上单独安装 Linux 可以参照修改。

六。运行 Gaussian

建立一个 Gaussian 输入文件，尽量复杂一些，比如对一个几十个原子的分子进行结构优化，这样好有时间察看运行状态。注意在输入文件中指定使用的 CPU 数目：

%NprocLinda=你做的节点数目（这个版本的 Linda 最多支持 4 个）

在其中任何一台计算机上，打开控制台，输入：

```
g98l <输入文件.gjf
```

不指定 out 文件是为了即时察看运行状态。

在本地机器进入迭代求解自洽场后(1502.exel)，在其他的机器上察看进程：

```
ps -a
```

如果有 1502.exel，那么就是成功了。

参考文献&致谢：

[1] yinpenggang, 建立 PC-Cluster for QC, www.redcluster.net

[2] Clarence K. Din and James C. Ianni, Gaussian03-on-Coffee Newbie Guide, Department of Chemistry, University of Pennsylvania, June 2005

[3] 水木社区 LinuxApp 版

[4] Elizerbeth, UniPod, Stanford.edu

[5] 量子化学网, <http://www.quantumchemistry.net>

[6] VMware, VMware Inc. <http://www.vmware.com>

[7] sysop, 简易 cluster 架设,动力论坛, <http://www.lasg.ac.cn>