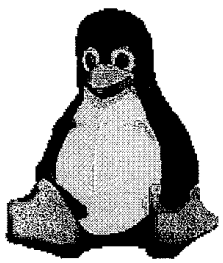
Linux-Systeme für quantenchemische Rechnungen

Matthias Mann

Institut für Organische Chemie der Technischen Universität Dresden, D-01062 Dresden



Da sich in den letzten Jahren PC-Systeme unter dem freien Betriebssystem LINUX für den Quantenchemiker zu einer echten Alternative gegenüber den wesentlich teureren Workstation- und Supercomputer-Plattformen entwickelt haben, wurden erste derartige Systeme auch an der Fachrichtung Chemie der TU Dresden installiert und in das bestehende IBM-RS6000-Cluster eingefügt.
Es zeigte sich, daß die Migration des größten Teils der bereits genutzten Software problemlos möglich ist. Der Schwerpunkt lag dabei auf *ab initio* quantenchemischen Programmpaketen sowie Molekülgraphik-Software zur Vor- und Nachbereitung von numerischen Aufgaben.
Anhand von *ab initio* Berechnungen an einigen schwefelorganischen Verbindungen wird die Performance der Linux-Rechner mit anderen Plattformen verglichen. Am Beispiel von GAMESS(US) wird außerdem gezeigt, welchen Einfluß der verwendete Compiler auf die Geschwindigkeit des Programmcodes hat.
Es werden Beispielkonfigurationen vorgestellt, bei denen mit Hilfe des Batch-Systems NQS eine effektive Rechnerauslastung und die Integration in ein heterogenes Umfeld möglich ist.