

CREST



Opis

CREST (engl. *Conformer-Rotamer Ensemble Sampling Tool*) je računalno kemijska aplikacija koja se temelji na xTB (engl. *extended tightbinding*) metodama, a koristi za generiranje i analizu različitih konformacija molekula.

CREST je aplikacija otvorenog koda, a kao i aplikacija xTB, podržava **OpenMP** paralelizaciju što znači da radi s **dijeljenom memorijom** te se ne može širiti van jednog računalnog čvora.



Budući da se zasniva na *extended tightbinding* aproksimacijama, za svoje izvršavanje treba funkcionalnosti aplikacije **xTB**.

Iz tog razloga, kako bi koristili određenu verziju CREST-a, trebate učitati i modul željene verzije **xTB-a**.

Verzije

CREST verzija	Preporučena xTB verzija	CREST modul	Preporučeni xTB modul	Paralelizacija	Supek	Padobran
2.12	6.4.0	scientific/crest/2.12-gnu	scientific/xtb/6.4.0-gnu	OpenMP	✓	✓

Službena dokumentacija

- <https://crest-lab.github.io/crest-docs/>

Primjeri



CREST će vrijednost **OMP_NUM_THREADS** dobiti po definiranju **ncpus** varijable u zaglavlju PBS skripte.

U primjeru niže, aplikacija će se pokrenuti s 32 OpenMP threada.

Bash skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l ncpus=32

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/crest/2.12-gnu
module load scientific/xtb/6.6.0-gnu

crest C2H4BrCl-opt.xtbopt.xyz --chrg 0 --uhf 0 --opt vtight --alpb chcl3
```