

Quantum ESPRESSO



- Opis
- Verzije
- Službena dokumentacija
- Primjeri
 - Napomene
 - CPU
 - MPI
 - OpenMP
 - MPI + OpenMP
 - GPU
 - Single GPU

Opis

Quantum ESPRESSO je računalno-kemijska aplikacija koja je optimizirana za simulacije u fizici čvrstog stanja. Temelji se na teoriji funkcionala gustoće, a koristi se ravninskim valovima (engl. *plane wave*) koji se koriste za opisivanje ponašanja elektrona u čvrstom stanju.

Quantum ESPRESSO je aplikacija otvorenog koda, a podržava **hibridnu paralelizaciju, MPI + OpenMP**, kao i upotrebu grafičkih procesora.

Verzije

CPU									
Verzija	Uključuje thermo_pw	Modul	MPI implementacija (Supek)	Supek	Padobran	Prevodilac	Paralelizacija		
6.8	1.6.0	scientific/6.8-gnu	Cray MPICH	✓	✗	GNU	OpenMP	Ako aplikaciju želite dijeliti isključivo u OpenMP threadove, morate zatražiti jedan računalni čvor, budući da u ovom slučaju aplikacija radi s dijeljenom memorijom.	
		scientific/6.8/openmpi-5.0.1/gcc-11.2.1	Open MPI 5	✓	✗			U primjeru niže, aplikacija će se pokrenuti s 32 OpenMP threada.	
		scientific/6.8-intel	Open MPI 4	✓	✗			Intel + MKL	
		scientific/7.0-gnu	Cray MPICH	✓	✓	GNU		module load scientific/7.1-gnu pw.x -i input.in	
		scientific/7.0/openmpi-5.0.1/gcc-11.2.1	Open MPI 5	✓	✗			MPI + OpenMP Budući da aplikacija podržava hibridnu paralelizaciju, MPI procese možete podijeliti na OpenMP threadove.	



Ukoliko primijetite sporo izvođenje na **Padobranu**, preporučuje se korištenje privremenog direktorija **TMPDIR**. Naime, ponekad *input/output* (čitanje/pisanje) može biti usko grlo u izvođenju posla.

Prije pokretanja CASTEP-a iz privremenog direktorija, potrebno je tamo premjestiti sve potrebne input datoteke, npr.:

```
cp -r * ${TMPDIR} && cd ${TMPDIR}
```

Po završetku izvođenja, potrebno je vratiti nazad željene output datoteke, npr.:

```
cp -r * ${PBS_O_WORKDIR}
```

CPU

MPI

Aplikaciju možete dijeliti na razini MPI procesa.

U primjeru niže, aplikacija će pokrenuti 32 MPI procesa.

PBS skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=32:mem=2gb
#PBS -l place=pack

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/7.1-gnu

mpiexec pw.x -i input.in
```

Bash skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=1:ncpus=32:mem=64gb

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/7.1-gnu

pw.x -i input.in
```

MPI + OpenMP

Budući da aplikacija podržava hibridnu paralelizaciju, MPI procese možete podijeliti na OpenMP threadove.

7.0	1.7.0	scientific/qe/7.0-intel	Open MPI 4	✓	✗	U primjeru niže, aplikacija će stvoriti 8 MPI procesa, podijeljenih u 4 OpenMP threada. Intel + MKL MPI + OpenMP
7.1	1.7.1	scientific/qe/7.1-gnu	Cray MPICH	✓	✓	PBS skripta GNU <pre> #PBS -q cpu #PBS -l select=8:ncpus=4:mem=8gb #PBS -l place=pack cd \${PBS_O_WORKDIR} module load scientific/qe/7.1-gnu mpirun -d \${OMP_NUM_THREADS} --cpu-bind depth pw. input.in </pre>
		scientific/qe/7.1/openmpi-5.0.1/gcc-11.2.1	Open MPI 5	✓	✗	
		scientific/qe/7.1-intel	Open MPI 4	✓	✗	
7.2	1.8.1	scientific/qe/7.2-gnu	Cray MPICH	✓	✓	GPU Single GPU Aplikacija može koristiti jedan grafički procesor koji se definira SGE opcijom ngpus , a koja će u okolinu izvesti varijablu CUDA_VISIBLE_DEVICES , čija će vrijednost biti UUID grafičkog procesora koji Vam je sustav dodijelio. Broj CPU jezgri definira se putem OpenMP dretvi, odnosno u zaglavlju skripte odabirom vrijednosti ncpus . U primjeru niže, aplikacija će se pokrenuti s jednim grafičkim procesorom i 4 CPU jezgre.
		scientific/qe/7.2/openmpi-5.0.1/gcc-11.2.1	Open MPI 5	✓	✗	
		scientific/qe/7.2-intel	Open MPI 4	✓	✗	
Verzija	Uključuje thermo_pw	Modul	MPI implementacija (Supek)	Supek	Padobran	Prevođenje i Paralelizacija
7.1	1.7.1	scientific/qe/7.1-nvhpc	/	✓	✗	PBS skripta <pre> #PBS -q gpu #PBS -l select=1:ngpus=1:ncpus=1:mem=64gb cd \${PBS_O_WORKDIR} module load scientific/qe/7.1-nvhpc pw.x -i input.in </pre>
7.2	1.8.1	scientific/qe/7.2-nvhpc	/	✓	✗	

Službena dokumentacija

- https://www.quantum-espresso.org/Doc/user_guide/

Primjeri

Napomene



Podrazumijevano PBS ponašanje je „slobodno“ razmještanje *chunkova* po slobodnim čvorovima.

Zbog aktualnog **cray-pals** buga, trenutno je ograničen broj poslova koji se mogu širiti van čvora kad koriste Cray-ev **mpie xec**. Ako Vaš posao prijeđe taj limit te proširi svoje MPI procese na druge čvorove, prekinut će se.

Kako bi sigurno izbjegli bug, potrebno je sve MPI procese smjestiti na isti čvor. Najjednostavniji način je korištenjem opcije **#PBS -l place=pack**.

- ✓ Kad u zaglavlju PBS skripte definirate vrijednost varijable **ncpu**s, u okolinu se automatski doprema ista vrijednost **OMP_NUM_THREADS** varijable.

- ✓ Zbog nemogućnosti **Open MPI 4** da iskoristi puni potencijal *Sli ngshot* mreže, preporučljivo je aplikaciju zadržati unutar granica jednog čvora, koristeći:

```
#PBS -l place=pack
```

- ✓ MPI pokretač za **Cray MPICH** verzije:

```
mpiexec [-d $OMP_NUM_THREADS --cpu-bind  
depth] pw.x
```

MPI pokretač za **Open MPI** verzije:

```
mpirun --hostfile $PBS_NODEFILE [-x  
$OMP_NUM_THREADS] pw.x
```