

BAGEL



- - Opis
 - Verzije
 - Službena dokumentacija
 - Primjeri
 - MPI

Opis

BAGEL (engl. *Brilliantly Advanced General Electronic-structure Library*) je računalno-kemijska aplikacija za izračune elektronskih struktura.

Aplikacija je otvorenog koda, a podržava MPI paralelizaciju što znači da radi s **raspodijeljenom memorijom** te se može širiti van jednog računalnog čvora.

Verzije

Verzija	Modul	Prevodioc	Podrška	Paralelizacija	Supek	Padobran
22.06 *	scientific/bagel/22.06-intel	Intel (+ MKL)	CPU	MPI	✓	✗
	scientific/bagel/22.06	GNU			✗	✓

* <https://github.com/qsimate-open/bagel>, master branch, commit **2955e4d** (Jun 3, 2022)



Ne podržava Crayevu MPICH implementaciju već koristi Open MPI, na oba resursa.

Službena dokumentacija

- <https://nubakery.org/index.html>

Primjeri

MPI

U primjeru niže, aplikacija će pokrenuti 8 MPI procesa.



Zbog nemogućnosti Open MPI-ja da iskoristi puni potencijal *S/ingshot* mreže, preporučljivo je aplikaciju zadržati unutar granica jednog čvora, koristeći:

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

Bash skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=8:mem=1gb
#PBS -l place=pack

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/bagel/22.06-intel

mpiexec BAGEL input.json
```