

SIESTA



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

Opis

SIESTA je računalno-kemijska aplikacija koja se primarno koristi u računalnoj kemiji, fizici materijala i srodnim područjima za simulaciju materijala i proučavanje njihovih svojstava, na atomskoj razini. Omogućava simulaciju površina, molekula i kristalnih sustava.

SIESTA je aplikacija otvorenog koda, a na računalnom klasteru Supek, pripremljena je s podrškom za **MPI paralelizaciju**, što znači da se može širiti van jednog računalnog čvora.

Verzije

Verzija	Modul	Prevodioc	Podrška	Paralelizacija	Supek	Padobran
4.1.5	scientific/siesta/4.1.5-gnu	GNU	CPU	MPI	✓	✗

Službena dokumentacija

- <https://departments.icmab.es/leem/siesta/Documentation/index.html>

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**.

MPI

U primjeru niže, aplikacija će pokrenuti 4 MPI procesa.

PBS skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=4:mem=1gb
#PBS -l place=pack

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/siesta/4.1.5-gnu

mpiexec siesta Fe.fdf
```