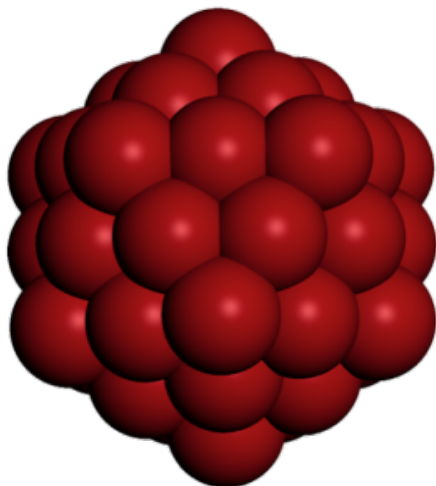


TURBOMOLE



- [Opis](#)
- [Verzije](#)
- [Službena dokumentacija](#)
- [Primjeri](#)
 - [Priprema ulaznih podataka - TmoleX](#)
 - [OpenMP \(SMP\)](#)
 - [MPI](#)

Opis

TURBOMOLE je računalno-kemijska aplikacija općenitog tipa koja nudi širok raspon metoda, uključujući HF, DFT, RI-RPA, MP2, CC2, CCSD i druge. Omogućava proračune elektronske strukture molekula i materijala, NMR parametara, energija aktivacije reakcije i drugih svojstava.

Može se koristiti za proračune malih organskih molekula, kompleksnih biomolekula, kao i za proračune u čvrstom stanju.

TURBOMOLE je zatvorenog koda, a može se paralelizirati na **OpenMP** ili **MPI** razini.

Verzije

verzija	modul	podrška	paralelizacija	Supek	Padobran
7.7	scientific/turbomole/7.7	CPU	OpenMP, MPI	✓	✗
7.7.1	scientific/turbomole/7.7.1	CPU	OpenMP, MPI	✓	✗
7.8	scientific/turbomole/7.8	CPU	OpenMP, MPI	✓	✗

Službena dokumentacija

- [TURBOMOLE priručnik](#)

Primjeri

Priprema ulaznih podataka - TmoleX

Za pripremu ulaznih podataka, odnosno *input* datoteka, korišten je programski paket **TmoleX**.



Kako bi se TmoleX uspješno pokrenuo, potrebno je spojiti se na pristupni čvor uz proslijeđivanje X11.

U slučaju korištenja **Linuxa** ili **macOS-a**, koristite naredbu:

```
ssh -X -i ~/.ssh/id_rsa username@login-cpu.hpc.srce.hr
```

U slučaju korištenja **Windowsa**, potrebno je preuzeti aplikaciju **Xming** te je pokrenuti prije pokretanja **PuTTY**-ja.

Unutar PuTTY-ja, potrebno je uključiti **X11 forwarding** (*Connection* → *SSH* → *X11*, *Enable X11 forwarding*).

Aplikaciju je moguće pokrenuti na **oba pristupna čvora** učitavanjem modula *turbomole* u **terminalu** i pozivom aplikacije (TmoleX23).

Pokretanje aplikacije TmoleX

```
$ module load scientific/turbomole/7.7
$ TmoleX23
```

OpenMP (SMP)

Niže je jednostavan primjer PBS skripte koja će koristiti 4 procesorske jezgre, odnosno 4 OpenMP threada (SMP = *shared-memory parallelism*), a provodi optimizaciju jednostavne organske molekule. Unutar GUI aplikacije **TmoleX**, učitane su koordinate molekule, a aplikacija je potom postavke simulacije (metoda, uvjeti...) pohranila u *control* datoteku.

Ključna riječ, odnosno TURBOMOLE naredba **jobex** poziva se u direktoriju u kojem se nalaze ostale *input* datoteke.

Gotove ulazne podatke, s PBS skriptom za podnošenje, možete preuzeti u obliku [zip archive](#).

PBS skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l ncpus=4

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/turbomole/7.7

export PARA_ARCH=SMP
export PARNODES=$OMP_NUM_THREADS
export PATH=$TURBODIR/bin/`sysname`: $PATH
export PERL_BADLANG=0

jobex -level scf -ri -c 50 -energy 6 -gcart 3
```

MPI

U primjeru niže, aplikacija će pokrenuti 4 MPI procesa.

Primjer je identičan prethodno opisanom primjeru (izuzev tipa, odnosno razine paralelizacije).



PBS opcija:

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

nastoji postići da se svi MPI procesi (**select** vrijednosti, odnosno *PBS chunkovi* zadrže unutar istog čvora.

PBS skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=4
#PBS -l place=pack

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/turbomole/7.7

export PARA_ARCH=MPI
export PARNODES=$(cat ${PBS_NODEFILE} | wc -l)
export PATH=${TURBODIR}/bin/`sysname`: $PATH
export PERL_BADLANG=0
export TURBOTMPDIR=$TMPDIR

jobex -level scf -ri -c 50 -energy 6 -gcart 3
```