

OpenMolcas



- [Opis](#)
- [Verzije](#)
 - [Službena dokumentacija](#)
- [Primjeri](#)
- [CPU](#)
 - [MPI + OpenMP](#)
 - [MPI](#)
 - [OpenMP](#)

Opis

OpenMolcas je računalno-kemijska aplikacija temeljena na aplikaciji MOLCAS (Molecular Calculation System). Korisnicima omogućuje izvođenje /predviđanje elektronskih struktura molekula, energija, optičkih svojstava, reakcijskih mehanizama i drugog.

Aplikacija je otvorenog koda, a podržava **hibridnu paralelizaciju, MPI + OpenMP**.

Verzije

| Verzija | Modul | Podrška | Paralelizacija | Prevodioc | Knjižnice | Supek | Padobran |
|---------|-------------------------------------|---------|----------------|-----------|-----------|-------|----------|
| 23.06 | scientific/openmolcas/23.06-gnu+mkl | CPU | MPI + OpenMP | GNU | Intel MKL | ✓ | ✗ |

Službena dokumentacija

- [OpenMolcas priručnik](#)

Primjeri



Kad u zaglavlju PBS skripte definirate vrijednost varijable `nprocus`, u okolinu se automatski doprema ista vrijednost `OMP_NUM_THREADS` varijable.

CPU

MPI + OpenMP

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

U primjeru niže, aplikacija će stvoriti 2 MPI procesa, podijeljenih u 2 OpenMP *threada*.

PBS skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=2:ncpus=2
#PBS -l place=pack

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/openmolcas/23.06-gnu+mkl

pymolcas --nprocs $(wc -l 0<${PBS_NODEFILE}) --nthreads ${OMP_NUM_THREADS} example.input
```

MPI

Ako aplikaciju ne želite dijeliti u OpenMP *threadove*, možete koristiti paralelizaciju isključivo na razini MPI procesa.

U primjeru niže, aplikacija će pokrenuti 4 MPI procesa.

PBS skripta

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

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/openmolcas/23.06-gnu+mkl

pymolcas --nprocs $(wc -l 0<${PBS_NODEFILE}) example.input
```

OpenMP

Ako aplikaciju želite dijeliti isključivo u OpenMP *threadove*, morate zatražiti jedan računalni čvor, budući da u ovom slučaju aplikacija radi s **dijeljenom** memorijom.

U primjeru niže, aplikacija će se pokrenuti s 4 OpenMP *threada*.

Bash skripta

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

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/openmolcas/23.06-gnu+mkl

pymolcas --nthreads ${OMP_NUM_THREADS} example.input
```