

Dalton / LSDalton

blocked URL

- [blocked URL](#)
- [Opis](#)
- [Verzije](#)
 - [Dalton](#)
 - [LSDalton](#)
- [Službena dokumentacija](#)
- [Primjeri](#)
 - [Napomene](#)
 - [Paralelno izvođenje](#)

Opis

Programski paket **Dalton** sastoji se od dvije aplikacije; **Dalton** i **LSDalton**.

Dalton je znanstvena aplikacija koja se koristi za izvođenje kvantno-kemijskih računa, odnosno za računanje molekularnih svojstava i struktura, prije svega malih molekula. Aplikacija **LSDalton** je posebno usmjerena na proračune velikih molekularnih sustava.

Dalton je otvorenog koda, a podržava MPI paralelizaciju što znači da radi s raspodijeljenom memorijom te se, prilikom izvođenja na Supeku, može širiti van jednog računalnog čvora.

Verzije

Dalton

Verzija	Modul	Prevodilac	Podrška	Paralelizacija	Supek	Padobran
2020.1 *	scientific/dalton/2020.1-gnu	GNU	CPU	MPI	✓	✓

* Verzija je, po uzoru na onu s računalnog klastera Isabella, prevedena s drugačijim parametrima u *header* datotekama.

```
DALTON/include/rsprp.h
MAXLBL = 30000

DALTON/include/infvar.h
MAXWOP = 1500000

DALTON/include/maxorb.h
MXSHEL = 8000
MXCORB = 7000

DALTON/include/aovec.h
MXAOVC = 72

DALTON/include/pcmdef.h
MXSP = 2000
```

LSDalton

Verzija	Modul	Prevodilac	Podrška	Paralelizacija	Supek	Padobran
---------	-------	------------	---------	----------------	-------	----------

Službena dokumentacija

- [Dalton 2020.1 priručnik](#)
- [LSDalton 2020.0 priručnik](#)

Primjeri

Napomene

! Zbog aktualnog **cray-pals buga** na **Supeku**, trenutno je ograničen broj poslova koji se mogu širiti van čvora kad koriste Crayev **mpirexec**. Ako Vaš posao prijeđe taj limit i proširi svoje MPI procese na druge čvorove, prekinut će se.

Kako bi izbjegli taj *bug*, sigurnije je sve MPI procese smjestiti na isti čvor.

Najjednostavniji način je korištenjem opcije **#PBS -l place=pack**.

! Aplikacija Dalton može maksimalno koristiti 16000 MB radne memorije, zadano kao argument opcije **-mb**.

Kako bi izbjegli prekide poslova, u zaglavlju zatražite nešto više memorije nego što će aplikacija koristiti, zbog mogućnosti povremenih prekoračenja.

U primjeru je zatraženo ukupno 16 chunk × 1300 MB/chunk = **20800 MB**.

Paralelno izvođenje

U primjeru niže, aplikacija će pokrenuti 16 MPI procesa, na 16 CPU jezgara.

Bash skripta



```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=16:mem=1300mb
#PBS -l place=pack

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load "scientific/dalton/2020.1-gnu"

export DALTON_TMPDIR=${TMPDIR}
export DALTON_LAUNCHER="mpirexec"
export JOB="input"

dalton -mb 16000 -nobackup ${JOB} ${JOB} ${JOB}
```

2020.0	scientific ic /lsdalton/2020. 0-gnu	GNU	CPU	MPI		
--------	--	-----	-----	-----	---	---