

CENSO

blocked URL

- blocked URL
 - Opis
 - Verzije
 - Službena dokumentacija
 - Primjeri
 - Napomene
 - Primjer 1
 - Primjer 2

Opis

CENSO (engl. **C**ommandline **E**NERgetic **S**ORTing) je aplikacija za računalnu kemiju, tj. algoritam za sortiranje konformacijskih skupova, dobivenih iz CREST posla. Temelji se "tight-binding" aproksimaciji elektronske strukture molekula, a razvijaju je inženjeri **Grimme lab**, poznati po aplikacijama xTB i CREST.

CENSO radi u kombinaciji s drugim računalno-kemijskim aplikacijama poput xTB, CREST, ORCA i TURBOMOLE.

CREST je otvorenog koda, a podržava **OpenMP** paralelizaciju što znači da radi s **dijeljenom memorijom** te se ne može širiti van jednog računalnog čvora.

Verzije

Verzija	Modul	Podrška	Paralelizacija	Supek	Padobran
1.2.0	scientific/censo/1.2.0	CPU	OpenMP	✓	✓

Službena dokumentacija

- https://xtb-docs.readthedocs.io/en/latest/CENSO_docs/censo.html

Primjeri

Napomene



Potrebno je obratiti pozornost na dvije opcije kojima se upravlja paralelnim računom.

- `-P` ili `--maxthreads`
 - definira broj neovisnih računa tijekom posla.
- `-O` ili `--omp`
 - definira broj procesorskih jezgri koje će se pripisati jednom neovisnom računu.

Npr. 5 neovisnih (**maxthreads**) računa, od kojih svaki koristi 4 procesorske jezgre (**omp**) zahtjeva 5×4 , odnosno 20 slobodnih procesorskih jezgara.

Važno je da je umnožak spomenutih dviju opcija jednak vrijednosti tj. argumentu opcije `ncpus` iz zaglavlja skripte.

Primjer 1

U primjeru niže, aplikacija će pokrenuti 8 neovisnih računa, a svaki će koristiti po 1 procesorsku jezgru.

Bash skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=8:ncpus=1:mem=2gb
#PBS -l place=pack

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/censo/1.2.0

censo -inprc $CENSORC -inp input.xyz -part0 on -
chrg 1 -solvent h2o --maxthreads 8 --omp 1
```

Primjer 2

U primjeru niže, aplikacija će pokrenuti 2 neovisna računa, a svaki će koristiti po 4 procesorske jezgre.

Bash skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=8:ncpus=1:mem=2gb
#PBS -l place=pack

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/censo/1.2.0

censo -inprc $CENSORC -inp input.xyz -part0 on -
chrg 1 -solvent h2o --maxthreads 2 --omp 4
```

