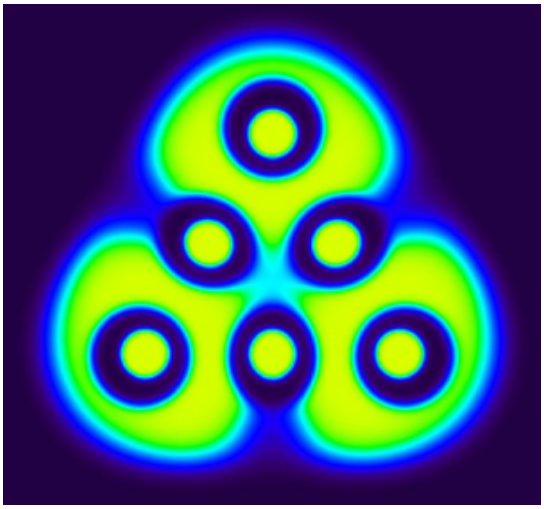
Multiwfn



Opis

Multiwfn je računalno-kemijska aplikacija za analizu elektronskih valnih funkcija.

Multiwfn je otvorenog koda, a posjeduje i mogućnost rada u GUI-ju (grafičkom korisničkom sučelju).

Službena dokumentacija

- Službene stranice
- Manual
- Quick start

Verzije

Verzija	Modul	Kompajler	Podrška	Paralelizacija *	Supek	
3.8	`scientific/multiwfn/3.8`	GNU C kompajler, Intel Fortran kompajler	CPU	SMP	✅	✅

Kod paralelizacije s **dijeljenom memorijom** (engl. *Shared-Memory Parallelism*, *SMP*) program je podijeljen na više *threadova* i svi imaju pristup istoj, tj. zajedničkoj (dijeljenoj) memoriji.

To znači da se aplikacija mora izvršavati na **jednom radnom čvoru**.

Izvršne datoteke

Primjer korištenja

- Za interaktivno pokretanje uz GUI, prvo je potrebno pokrenuti interaktivan posao, uz prosljeđivanje X:

```
$ qsub -I -X -q cpu -l select=1:ncpus=16:mem=32gb
```

- Po pokretanju interaktivno posla, smjestit ćete se u home direktorij. Navigirajte do direktorija u kojem se nalaze Vaša input datoteka, npr.:

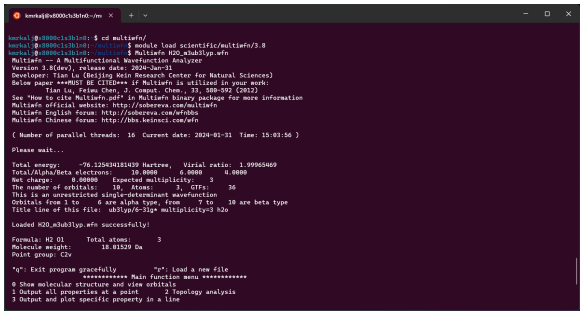
```
$ cd multiwfn/
```

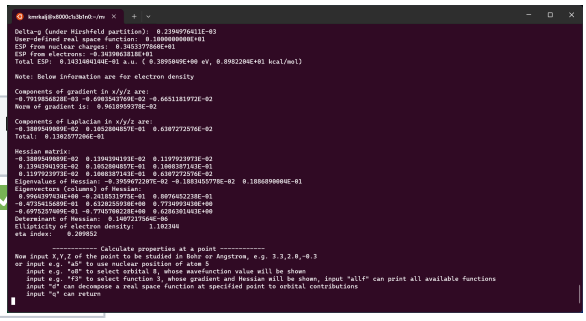
- Učitajte modul, a zatim pokrenite aplikaciju.
  - Broj traženih jezgri, odnosno argument **`-nt`** opcije aplikacije preuzet će se iz Vaše okoline, tj. iz **`ncpus`** opcije.
  - **`OMP_STACKSIZE`** varijabla automatski će se postaviti po formuli **`(0.75*mem)/ncpus`**

```
$ module load scientific/multiwfn/3.8

$ Multiwfn H2O_m3ub3lyp.wfn
```

- U *promptu* odaberite željene opcije:





Multiwfn	Multiwfn_noGUI

Napomena

Kako bi se aplikacija uspješno pokrenula uz korištenje grafičkog sučelja, potrebno je spojiti se na pristupni čvor uz prosljeđivanje 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*).