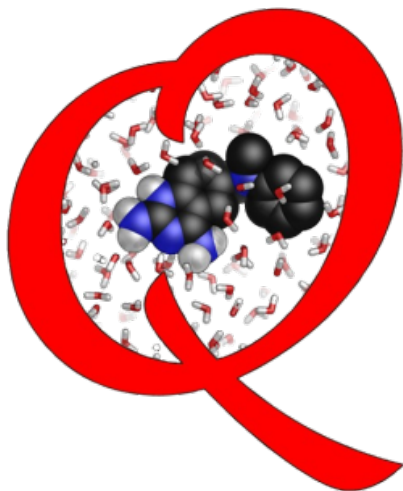


Q6



- - Opis
 - Verzije
 - Službena dokumentacija
 - Izvršne datoteke
 - Primjeri
 - MPI

Opis

Q6 je skup računalno-kemijskih alata za molekularnu dinamiku.

Aplikacija je otvorenog koda, a podržava MPI paralelizaciju što znači da radi s **raspodijeljenom memorijom** te se može širiti van jednog računalnog čvora.

Verzije

Verzija	Modul	Kompajler	Podrška	Paralelizacija	Supek	F
23.11 *	scientific/q6/23.11	GNU	CPU	MPI	✓	

* <https://github.com/qusers/Q6>, master branch, commit **d993af2** (Nov 7 2023)



Aplikacija ne koristi Crayevu MPICH implementaciju već koristi Open MPI.

Službena dokumentacija

- [GitHub](#)
- [Priručnik](#)

Izvršne datoteke

Serijske	Qcalc6	Qdum6	Qdyn6	Qfep6	Qpi6	Qprep6
Paralelizirane	-	-	Qdyn6p	-	Qpi6p	-

Primjeri

MPI

- U primjeru niže, aplikacija će pokrenuti 32 MPI procesa.
 - Svakom MPI procesu dodijelit će se 500 MiB radne memorije.

Bash skripta

```
#PBS -q cpu
#PBS -l select=32:mem=500mb

cd ${PBS_O_WORKDIR}

module load scientific/q6/23.11

mpirun -hostfile ${PBS_NODEFILE} Qdyn6p input.inp
```



Padobran

U slučaju izvođenja na računalnom klasteru Padobran, aplikaciju je potrebno zadržati u granicama jednog čvora, dodavanjem opcije:

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