

Bagel

Korištenje

Dostupne verzije su:

Verzija	Modul
1.2.2	bagel/1.2.2
2022.06.03 *	bagel/2022.06.03

* <https://github.com/qsimulate-open/bagel>, master branch, commit **2955e4d** (Jun 3, 2022)

Primjer skripte za opis poslova:

bagel-parallel.sge

```
#$ -N bagel-parallel
#$ -q p28.q
#$ -pe *mpi 14
#$ -cwd

# load program environment
module load bagel/1.2.2

mpirun -machinefile $TMPDIR/machines -genvall \
  -genv MV2_ENABLE_AFFINITY 0 \
  -genv MKL_NUM_THREADS 1 \
  -np $NSLOTS BAGEL $1
```

Podnošenje posla

```
qsub bagel-parallel.sge input_datoteka.json
```



Važno

Aplikacija bagel se može širiti hibridno MPI procesima i MKL threadovima gdje svaki MPI proces može pokrenuti nekoliko MKL threadova. To znači da se vrijednosti parametara MKL_NUM_THREADS te -np (number of processes) mogu varirati, samo u tom slučaju je potrebno paziti da je njihov umnožak jednak broju zatraženih CPU slotova/jezgara.

Instalacija

Preduvjet za instalaciju aplikacije bagel jeste instalirana biblioteka boost. Biblioteka je instalirana u verziji 1.70 te je kompajlirana kompajlerom GCC-7.3.1 i MPI implementacijom mvapich-2.3. Kompajler gcc u verziji 7.3.1 je na klaster Isabella instaliran iz [Software Collections](#) repozitorija dodatnih paketa sustava CentOS 7. Tijek instalacije:

Otpakiranje i priprema

```
wget -c https://dl.bintray.com/boostorg/release/1.70.0/source/boost_1_70_0.tar.bz2
tar -xjf tar -xjf boost_1_70_0.tar.bz2 && cd boost_1_70_0
module load mpi/mvapich23-x86_64
scl enable devtoolset-7 './bootstrap.sh --with-toolset=gcc --prefix=/apps/boost/1.70/avx2'
```

U datoteku project-config.jam, na kraj je potrebno dodati:

Boost MPI

```
using mpi ;
```

Kompajliranje biblioteke boost

```
scl enable devtoolset-7 './b2 -j8 -a'  
scl enable devtoolset-7 './b2 install'
```

Kompajliranje aplikacije bagel

```
module load mpi/mvapich23-x86_64  
module load intel/2019  
scl enable devtoolset-7 './configure --enable-mkl --with-boost=/apps/boost/1.70/avx2/ --with-mpi=mvapich --  
enable-smith --prefix=/apps/bagel/1.2.2/avx2/'  
scl enable devtoolset-7 'make -j2'  
scl enable devtoolset-7 'make install'
```