

XTB

- [Primjer korištenja](#)
 - [Pokretanje XTB programa](#)
- [Pokretanje xTB/CREST paketa u mpisingle paralelnoj okolini](#)
- [Pokretanje CREST programa na mpisingle paralelnoj okolini](#)
- [Korištenje CENSO programa](#)
- [Korištenje XTB paketa na ScaleMP vSMP čvoru](#)
 - [Pokretanje CREST programa na ScaleMP vSMP čvoru](#)
 - [Pokretanje ENSO programa](#)
 - [Pokretanje ANMR programa](#)

O programu XTB i njegovim opcijama više na mrežnim stranicama.

Dostupne verzije su:

Verzija	Modul
6.2	xtb/6.2
6.2.2	xtb/6.2.2
6.3.3	xtb/vsmp
6.4.1	xtb/6.4.1
6.5.0	xtb/6.5.0
6.5.1	xtb/6.5.1
6.6.0	xtb/6.6.0

Primjer korištenja

```
module load xtb/*verzija*
```



Ukoliko želite aplikaciju izvoditi paralelno, nakon gore spomenute naredbe, u skriptu za opis posla **OBAVEZNO** je navesti i parametre:

```
module load xtb/*verzija*

export OMP_STACKSIZE=1G
export OMP_NUM_THREADS=$NSLOTS,1
export OMP_MAX_ACTIVE_LEVELS=1
```

Pokretanje XTB programa

Za pokretanje programa, potrebno je imati datoteku u formatu:

struc.xyz

20

C	2.081440	0.615100	-0.508430
C	2.742230	1.824030	-1.200820
N	4.117790	1.799870	-1.190410
C	4.943570	2.827040	-1.822060
C	6.440080	2.569360	-1.637600
O	7.351600	3.252270	-2.069090
N	0.610100	0.695090	-0.538780
O	2.095560	2.724940	-1.739670
O	6.705220	1.463410	-0.897460
H	0.303080	1.426060	0.103770
H	0.338420	1.050680	-1.460480
C	2.488753	-0.593400	-1.198448
H	2.416500	0.557400	0.532050
H	4.614100	1.081980	-0.670550
H	4.699850	3.794460	-1.373720
H	4.722890	2.844690	-2.894180
H	7.687400	1.448620	-0.860340
H	2.029201	-1.457008	-0.719999
H	2.170233	-0.542411	-2.238576
H	3.572730	-0.688405	-1.154998

Pokretanje xTB/CREST paketa u mpisingle paralelnoj okolini

Aplikacija nema mogućnost širenja na više čvorova te je obavezno korištenje paralelne okoline mpisingle.

Modul **xtb/6.4.1** doprema u okolinu xtb verziju 6.4.1 i CREST 2.11.1.

Primjer skripte za pokretanje posla s testnom datotekom struc.xyz u p28-mpisingle paralelnoj okolini dan je niže. Posao je pokrenut na jednom čvoru s 4 jezgre.

XTB

```
#!/bin/bash
#$ -N xtb_job
#$ -cwd
#$ -pe p28-mpisingle 4

module load xtb/6.4.1

export OMP_STACKSIZE=1G
export OMP_NUM_THREADS=$NSLOTS,1
export OMP_MAX_ACTIVE_LEVELS=1

xtb struc.xyz
```

Pokretanje CREST programa na mpisingle paralelnoj okolini

Aplikacija nema mogućnost širenja na više čvorova te je obavezno korištenje paralelne okoline mpisingle.

Za korištenje CREST-a u mpisingle paralelnoj okolini pripremljen je modul **xtb/6.4.1**. Naredba **module load xtb/6.4.1** u Vašu okolinu doprema CREST v. 2.11.1, no i xTB v.6.4.1 koji je nužan za provođenje izračuna.

Primjer skripte za pokretanje posla na testnoj datoteci **struc.xyz** (uz vodu kao odabrano otapalo) u p28-mpisingle paralelnoj okolini dan je niže. Posao je pokrenut na jednom čvoru s 4 jezgre.

[O programu CREST i njegovim opcijama više na mrežnim stranicama.](#)

CREST

```
#!/bin/bash
#$ -N CREST_job
#$ -cwd
#$ -pe p28-mpisingle 4

module load xtb/6.4.1

export OMP_STACKSIZE=1G
export OMP_NUM_THREADS=$NSLOTS,1
export OMP_MAX_ACTIVE_LEVELS=1

crest struc.xyz -gfn2 -g h2o -T $NSLOTS
```

U slučaju da neki od dijelova zahtjeva više memorije, program je moguće pokrenuti na ScaleMP vSMP čvoru.

Korištenje CENSO programa

CENSO se oslanja na druge zasebne programe (XTB,ORCA) te je prilagođena verzija enso programa. Na klasteru je pripremljen modul za korištenje CENSO/1.2.0 programa i vezan je uz XTB 6.4.1, CREST 2.11.1 i ORCA 5.0.2. S obzirom na prirodu programa nije moguće širenje van pojedinih čvorova te je obavezno korištenje mpisingle paralelne okoline.

Konfiguracijska datoteka .censorc nalazi se u direktoriju /apps/censo/ te je jedinstvena za sve korisnike i nije je potrebno konfigurirati za svakog korisnika. Sve opcije dostupne su kroz komandnu liniju pri opisivanju posla. Zbog ovakve konfiguracije pri pozivanju posla nužna je zastavica -inprc /apps/censo/.censorc

Program se postavlja u korisnikovu okolinu koristeći naredbu **module load censo/1.2.0**



OBAVEZNO!

Za korištenje censo programa obavezno je korištenje **mpisingle** paralelne okoline

Primjer skripte za korištenje programa CENSO

```
#$ -N censo_test
#$ -cwd
#$ -pe p28-mpisingle 14
module load censo/1.2.0
censo -inp VAŠI_ULAZNI_PODACI -O 7 -P 2 -inprc /apps/censo/.censorc
```

U primjeru su korištene zastavice -O i -P kako bi se raspodijeli posao pri čemu zastavica -P govori koliko paralelnih procesa se izvodi (u primjeru 2) i koliko svaki od njih koristi jezgara (7). Bitno je da umnožak -O i -P NE PRELAZI ukupan broj traženih jezgara. Više o korištenju censo programa možete pročitati na [web stranicama paketa](#).

Korištenje XTB paketa na ScaleMP vSMP čvoru

Za korištenje XTB paketa na ScaleMP vSMP čvoru pripremljen je poseban modul xtb/vsmp. Osim XTB programa kroz modul je moguće pokretati programe enso.py, crest i anmr.

primjer skripte za pokretanje posla:

XTB

```
#!/bin/bash
#$ -N xtb_job
#$ -cwd
#$ -pe vsmmp 2
#$ -j y
module load xtb/vsmmp
# Setting stacksize to unlimited
ulimit -s unlimited

#Use RAM as scratch
export TMPDIR="/ramfs/$TMPDIR"
export CORES=$(numabind --offset $NSLOTS)

taskset -c $CORES xtb -P $NSLOTS struc.xyz
```

Pokretanje CREST programa na ScaleMP vSMP čvoru

Prije nego se pokrene posao koji koristi crest program, nužno je izvesti slijedeće naredbe u direktoriju u kojem će se pokrenuti skripta za posao:

set_crest_at

```
module load xtb/vsmmp
set_crest_at puna_adresa_direktorija_u_kojem_ce_se_izvoditi_program_crest_i_ens
```

Program set_crest_at doprema program crest u zadani direktorij (npr. /home/korisnik/analiza), ako direktorij ne postoji program će ga sam napraviti i spremiti datoteke u njega. Osim programa crest dopremaju se i .ensorc i flags.dat datoteke koje su nužne za korištenje enso.py programa.

Ako se set_crest_at ne zada adresa, program će dopremiti datoteke u direktorij u kojem je on pokrenut. Taj direktorij se automatski upisuje u .ensorc datoteku.

[O programu crest i njegovim opcijama više na mrežnim stranicama.](#)

CREST

```
#!/bin/bash
#$ -N crest_job
#$ -cwd
#$ -pe vsmmp 2
#$ -j y
module load xtb/vsmmp
# Setting stacksize to unlimited
ulimit -s unlimited

#Use RAM as scratch
export TMPDIR="/ramfs/$TMPDIR"
export CORES=$(numabind --offset $NSLOTS)

taskset -c $CORES crest_run struc.xyz -T $NSLOTS -gfn2 -g chcl3 -nmr
```

Dio koda -T \$NSLOTS nužan je kako bi se program pokretao na broju jezgara koji je tražen, a sve nakon njega su primjeri opcija samog programa.

Pokretanje ENSO programa

Enso program ima određene zahtjeve kako bi se mogao uspješno izvršiti, a dva su postojanje datoteka .ensorc i flags.dat. Obje datoteke služe za podešavanje parametara i opcija programa enso. U programu .ensorc upisane su lokacije svih potprograma koje zahtjeva enso. Jedan od njih je i crest, a njegova lokacija je upisana pokretanjem programa set_crest_at. Ako se skripta za izvođenje posla programa enso ne izvodi u direktoriju u kojem se nalazi crest i ako to nije isti direktorij upisan u .ensorc doći će do neuspješnog izvođenja posla!!!

Prije pokretanja pravog posla, savjetuje se pokretanje programa s opcijom `--checkinput` kako bi se provjerili svi uvjeti za izvođenje programa

ENSO

```
#!/bin/bash
#$ -N enso_job
#$ -cwd
#$ -pe vsmc 2
#$ -j y
module load xtb/vsmc
# Setting stacksize to unlimited
ulimit -s unlimited

#Use RAM as scratch
export TMPDIR="/ramfs/$TMPDIR"
export CORES=$(numabind --offset $NSLOTS)

taskset -c $CORES enso --checkinput
```

Nakon uspješne provjere posao se pokreće tako da se umjesto `--checkinput` upiše `--run` opcija.

[O programu enso i njegovim opcijama više na mrežnim stranicama.](#)

Pokretanje ANMR programa

Anmr program moguće je izvesti nakon uspješnog izvođenja programa crest (s uključenom opcijom `-nmr`), te uspješnog izvođenja programa enso.

Za razliku od xtb, crest i enso programa, anmr nije moguće izvesti na ScaleMP vSMP čvoru već se on pokreće na bilo kojem drugom čvoru.

ANMR

```
#!/bin/bash
#$ -N anmr_job
#$ -cwd
#$ -pe p28-mpisingle 2
#$ -j y
module load xtb/vsmc
ulimit -s unlimited
export OMP_NUM_THREADS=$NSLOTS,1
anmr --mss 10
```

Savjetuje se zadržavanje parametra `--mss 10` ili manje zbog mogućeg problema s količinom memorije.

[O programu anmr i njegovim opcijama više na mrežnim stranicama.](#)